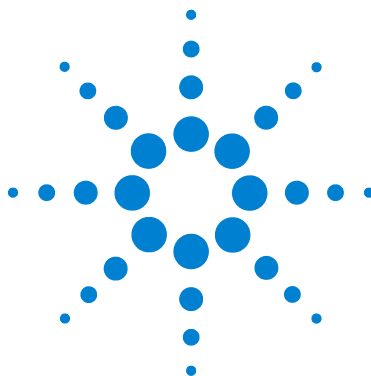




Agilent MassHunter
工作站软件
定性分析

精通指南



Agilent Technologies

声明

© Agilent Technologies, Inc. 2008

根据美国和国际版权法，未经安捷伦科技有限公司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

G3335-97060

版本

第二版，2008 年 10 月

美国印刷

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

Microsoft® 是 Microsoft Corporation 在美国的注册商标。

软件修订版

本指南在被替换前适用于 Agilent MassHunter 工作站软件 - 定性分析程序的 B.02.00 及更高版本。

如果您对本指南有任何建议，请发送电子邮件到 feedback_lcms@agilent.com。

担保说明

本手册内容按“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，安捷伦对本手册以及此处包含的任何信息不作任何明示或默示担保，包括但不限于针对某一特殊用途的适销性和适用性的默示担保。对于本手册或此处包含的任何信息可能出现的错误，或者因修改、使用本手册或此处包含的任何信息或因其性能方面的原因而造成的偶然或必然的损失，安捷伦不承担任何责任。如果安捷伦与用户签订了单独的书面协议，其中涉及本手册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 / 或软件是依据许可提供的，且只能根据此类许可的条款进行使用或复制。

有限权利声明

美国政府受限权利。授予联邦政府的软件和技术数据权利仅包括通常提供给最终用户的那些权利。Agilent 根据 FAR 12.211（技术数据）和 12.212（计算机软件）和（对于国防部）DFARS 252.227-7015（技术数据 - 商品）以及 DFARS 227.7202-3（商业计算机软件或计算机软件文档中的权利）来提供软件和技术数据方面的此常规商业许可。

安全声明

小心

小心提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。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，将导致人身伤害或死亡。除非您已完全理解并满足所指出的条件，否则请不要忽视警告提示而继续进行操作。

内容提要 ...

本指南包含有关学习如何使用 Agilent MassHunter 工作站软件 - 定性分析的信息。

开始练习之前，请阅读第 7 页的“[开始这些练习之前 ...](#)”中的说明。

练习 1 了解定性分析的基本知识

在本练习中，您将探究定性分析程序的多种强大功能。无论您使用的数据类型是什么，这些任务都至关重要。

练习 2 查找和识别化合物

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

练习 3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

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

参考信息

在本章中，您将学习有关定性分析程序的基本知识。

新增功能

B.02.00（定性分析）

- 支持 **Agilent MassHunter BioConfirm** 软件。您可以使用此软件创建、编辑和导入序列，然后对这些序列进行匹配。可以在工作单的蛋白质列提供序列。现在还包含化学数据词典编辑器。
- 支持包括 **BioConfirm** 在内的四种不同的工作流程。方法管理器中的每个工作流程均有其各自的方法、布局 and 特殊部分，可帮助您更轻松地完成任任务。
- 积分 UV 色谱图时，可以创建系统适用性计算。您可以指定不同的药典。
- 提取峰质谱图时，可自动扣除指定时间范围内的平均质谱图。
- 确定电荷态时，支持以下三种不同的同位素模型：常见有机分子、肽和无偏差。
- 确定电荷态时，可以将未分配电荷态的离子指定为单电荷。
- 最大熵解卷积得到了改进，可以创建更整洁的质谱图。可以增加迭代的数量并指定单一峰宽。
- 对于包含已解析同位素的化合物，您可以使用新的解卷积已解析同位素算法进行解卷积。
- 对于按分子特征查找化合物算法，有三种不同的目标数据类型。
- 您可以对由按分子特征查找化合物算法找到的化合物进行筛选，然后再将这些化合物写入 MHD 文件。此 MHD 文件供 **Mass Profiler** 和 **GeneSpring** 使用。
- 您可以在使用按分子特征查找化合物算法时自动提取 EIC 和原始质谱图。

- 您可以指定质量列表，将其包含在按分子特征查找化合物算法中或从中排除。您可以直接键入此列表或指定要使用的数据库。
- 确定按分子特征查找化合物算法的电荷态时，可以将未分配电荷态的离子指定为单电荷。
- 您可以指定是否要将只有一个离子的离子包含在按分子式特征查找化合物算法的结果中。
- 使用按分子式查找化合物算法时，您可以包含样品纯度计算。您可以根据面积或峰高进行计算，并且可以使用下列所有算法中的任意一种：TIC %、EIC/TIC %、ADC %、UV A %、UV B %、UV C % 或 TWC %。
- 如今，在搜索数据库算法中，分数基于的是单一同位素离子的准确质量、同位素间距以及同位素比。您可以控制在计算总分数时对这三种分数进行加权的方式。
- 按分子特征查找化合物算法已针对奇异元素进行改进。例如，改进后的算法适用于以下情况：化合物的多个同位素具有奇特的模式，或第一个同位素的丰度较低。
- 在按分子式查找化合物算法中，您可以控制计算总分数时不同分数的加权方式。分数的三个部分为质量数位置、同位素丰度和同位素间距。
- 化合物自动化算法包含匹配序列的选项。您也可以指定是否仅包含已识别的化合物。
- 您可以使用 **Microsoft PDF Generator** 插件将报告保存为 PDF 文件。该插件是一个 **Excel 2007** 插件，可从 **Microsoft** 网站免费下载。
- 您可以导出为下列多种格式：**ASR**、化合物摘要 **CSV**、**MGF** 和 **mzData**。**ASR** 格式包括内含样品纯度（每个数据文件对应一个文件或合并）的按分子式查找结果。化合物摘要 **CSV** 格式包括质量列表（每个数据文件对应一个文件或合并）。**MGF** 格式包括肽，内含 **MS/MS** 质谱图和前级离子（每个数据文件对应一个文件或合并）。**mzData** 格式现在有多种可用选项。

- 打印图形时，可以选择打印所有图形、仅打印突出显示的图形，或仅打印可见的图形。也可以从任意图形窗口的工具栏上直接打印。
- 支持最新的 Excel 2007 报告设计器插件。此插件支持并排打印图形。
- 支持 Easy Access B.02.00 版。
- 系统性能得到了提升。
- 您可以对化合物标签进行配置。您可以从 11 种不同的峰标签中进行选择。您可以选择仅包含所定义的第一个属性或者包含所有定义的属性。
- 现在，您即可以对用户界面进行配置。您可以根据分离类型、质量准确度、非 MS 检测器、BioConfirm 特征以及高级特征，选择要在用户界面显示何种类型的特征。

B.01.03 （定性分析）

- 支持双模式数据。
- 可以打开 UV 数据文件。
- 您可以在数据库中搜索分子式、质量或质量和保留时间。
- 您可以根据所指定的分子式在数据文件中查找化合物。
- 您可以指定分析报告和化合物报告中需包含的内容。
- 支持 Excel 2007，可进行定性分析。
- 可以对 UV 以及其他类型的色谱图进行积分。
- 可以查看 UV 质谱图。
- 可以自动化化合物报告的创建过程，包括要使用的查找化合物算法，以及要使用的化合物识别算法。

- 可以自动化分析报告的创建过程，包括要提取的色谱图、要提取的质谱图以及要使用的质谱图识别算法。

开始这些练习之前 ...

- 将安装磁盘上名为 **Data** 的未压缩格式文件夹复制到您硬盘上任意位置。

此文件夹包含这些练习中需要使用的所有数据文件。您可能需要首先从其 .zip 格式文件中提取数据文件。

注意

不要重复使用系统中已存在的示例数据文件，除非您确信这些文件是从磁盘上的原始文件复制而来的，并且只有您使用过这些文件。如果系统中已存在的示例数据文件与磁盘上的原始文件不能完全匹配，则这些练习中所得到的结果可能与本指南中所显示的结果不匹配。

目录

练习 1 了解定性分析的基本知识 11

适用于所有数据的基本任务 13

任务 1. 打开“定性分析”程序 13

任务 2. 放大和缩小色谱图 16

任务 3. 锚定色谱图 18

任务 4. 更改窗口布局 19

任务 5. 打印分析报告 21

适用于 MS-only 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 23

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS） 23

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS） 25

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS） 28

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务 35

任务 9. 提取色谱图（MS 和 MS/MS） 35

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS） 37

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS） 42

适用于 MS 和 UV 数据的任务 52

任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV） 52

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值（MS 和 UV） 54

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV) 57

练习 2 查找和识别化合物 61

适用于 MS-only 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 63

任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限用于 MS） 63

任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS） 67

任务 3. 打印化合物报告（仅限于 MS） 69

任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅限于 MS）	70
任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）	73
适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务	76
任务 1. 查找化合物（MS 和 MS/MS）	76
任务 2. 识别化合物并生成分子式（MS 和 MS/MS）	79
任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS)	82
任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取（MS 和 MS/MS）	84
练习 3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法	87
任务 1. 使用常规工作流设置和运行定性分析方法	89
任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法	94
任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作	99
任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法	104
参考信息	107
使用窗口	108
处理“数据浏览器”中的结果数据	109
对色谱图执行操作	110
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作	111
使用色谱图直观数据	111
工作流程	112
自定义报告模板	115



练习 1

了解定性分析的基本知识

适用于所有数据的基本任务 13

任务 1. 打开“定性分析”程序 13

任务 2. 放大和缩小色谱图 16

任务 3. 锚定色谱图 18

任务 4. 更改窗口布局 19

任务 5. 打印分析报告 21

适用于 MS-only 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 23

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS） 23

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS） 25

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS） 28

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务 35

任务 9. 提取色谱图（MS 和 MS/MS） 35

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS） 37

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS） 42

适用于 MS 和 UV 数据的任务 52

任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV） 52

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值
（MS 和 UV） 54

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV) 57

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

首先，应执行其说明独立于数据类型的任务。

- 在“任务 1”中，可以打开包含多个数据文件的程序。
- 在“任务 2”中，可以对特定的数据点进行放大和缩小。



1 了解定性分析的基本知识

- 在“任务 3”中，可以锚定色谱图，以使其在滚动时永远不会从视图中消失。
- 在“任务 4”中，可以更改窗口的布局。
- 在“任务 5”中，可以打印分析报告。

然后，可以选择处理 MS-only 数据、组合的 MS 和 MS/MS 数据，还是组合的 MS 和 UV 数据。在这些任务中，您可以处理 MS-only 数据：

- 在任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS）中，您可以提取不同级别的色谱图并合并 EIC。
- 在任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）中，您可以对色谱图进行积分、更改积分参数并计算积分峰的信噪比。
- 在任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）中，您可以从色谱图中的特定点和范围提取质谱图，了解如何求这些质谱图的平均值并了解减去后台数据得到的结果。

在这些任务中，您可以处理组合的 MS 和 MS/MS 数据：

- 任务 9. 提取色谱图（MS 和 MS/MS）
- 任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS）
- 任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）

在这些任务中，您可以处理组合的 MS 和 UV 数据：

- 任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV）
- 任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值（MS 和 UV）
- 任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV)

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 – 您可按照这些常规说明亲自体验该程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或倾向于使用逐步学习过程，请使用这些说明。
- 注释 – 如果要了解有关练习中每一步骤的提示及附加信息，请阅读这些注释。

适用于所有数据的基本任务

任务 1. 打开 “ 定性分析 ” 程序

在此任务中，您可以使用当前方法来打开多个数据文件。

任务 1. 打开包含多个数据文件的 “ 定性分析 ” 程序。

步骤	详细说明	注释
1 打开 “ 定性分析 ” 程序。 打开数据文件 sulfas-PosAutoMSMS、sulfas-PosMS.d 和 sulfas-PosTargetedMSMS.d，这些文件位于文件夹 \\MassHunter\Data 或您从其中复制它们的文件夹。	a 双击 Agilent MassHunter 定性分析 图标 。 系统将显示 “ 打开数据文件 ” 对话框。 b 转到文件夹 \\MassHunter\Data 或示例文件所在的文件夹。	- sulfas-PosMS.d 文件包含 MS (TOF 或 Q-TOF) 数据，而 sulfas-PosAutoMSMS.d 和 sulfas-PosTargetedMSMS.d 文件包含 MS 和 MS/MS (Q-TOF) 数据。 - 当窗口处于活动状态时，通过按 F1 键可以获取有关任何窗口、对话框或选项卡的帮助。

- 确保单击**使用当前方法**。
- 确保从所选的方法中运行“**打开文件**”操作复选框处于清除状态。

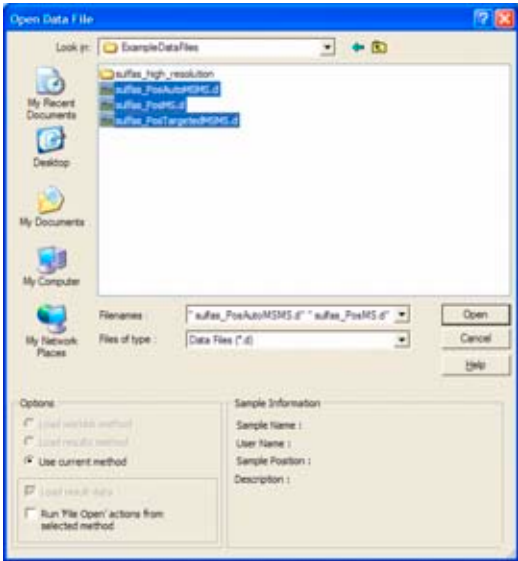


图 1 打开软件时打开数据文件

1 了解定性分析的基本知识

任务 1. 打开“定性分析”程序

任务 1. 打开包含多个数据文件的“定性分析”程序。（续）

步骤	详细说明	注释
	c 按住 Shift 键的同时单击 sulfas_PosAutoMSMS.d、sulfas_PosMS.d 和 sulfas-PosTargetedMSMS.d。 d 单击打开。 数据浏览器中将显示所有的三个数据文件，“色谱图结果”中将显示 1-3 个色谱图。	• 如果改按 Ctrl 键，则可以选取列表中彼此不相邻的文件。 • 此时在主窗口中看到的内容取决于打开这些文件之前所使用的方法、布局、显示和图谱设置。

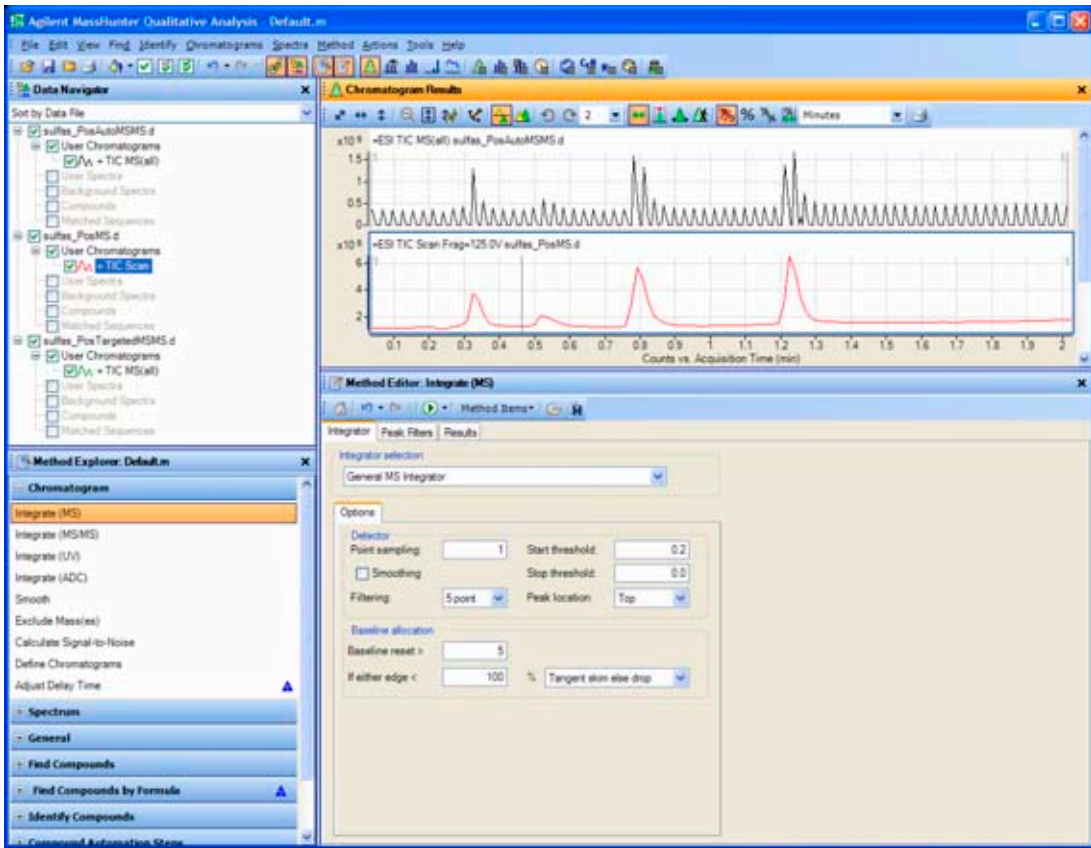


图 2 “定性分析”主窗口

任务 1. 打开包含多个数据文件的“定性分析”程序。（续）

步骤	详细说明	注释
2 使主窗口返回其默认工作流程“常规”。系统将调用默认方法和布局。 确保您可看到所有三个色谱图。	a 如有必要，请单击工具 > 配置工作流程 > 常规。 b 单击“色谱图结果”工具栏中的“最大列表窗格数”图标旁边的向下箭头，并选择“3”。	- 显示和图谱设置将始终相同，即使切换到“常规”工作流后也是如此。根据不同的具体情况，这些设置也会有所不同。 - 可以通过单击查看 > 窗口布局 > 调用布局的方式来更改布局。

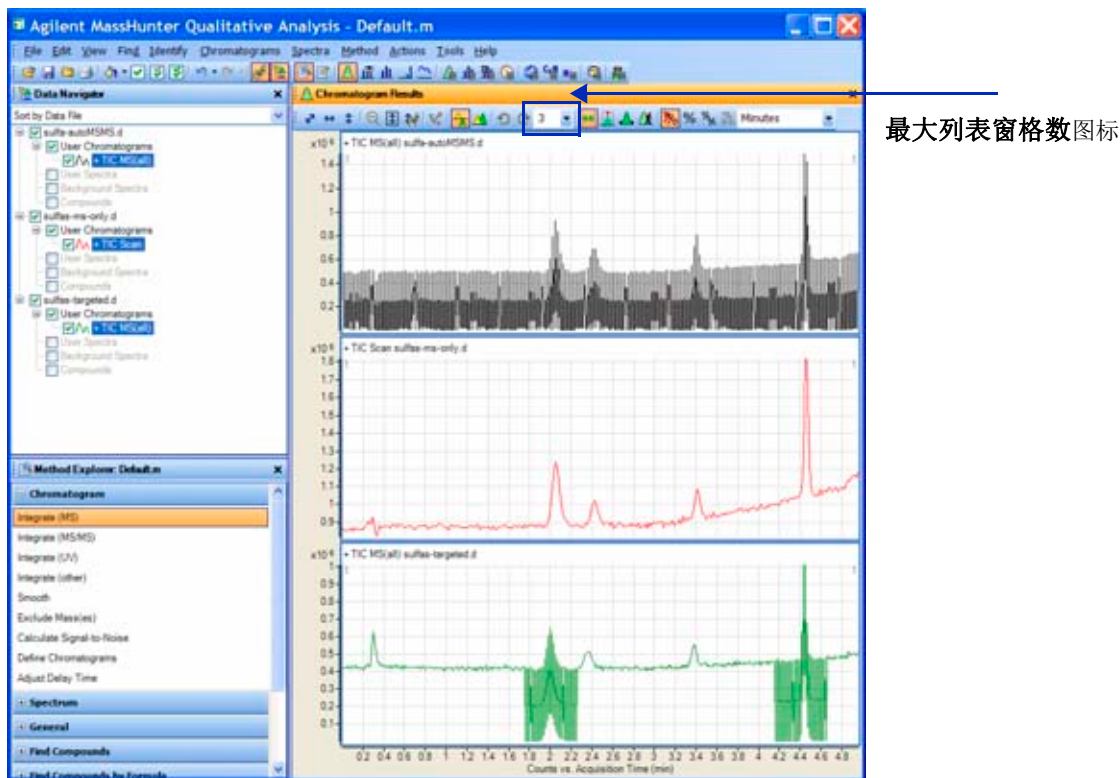


图 3 选中“常规工作流程”的“定性分析”主窗口。系统将调用默认方法和默认布局，但不一定会调用默认显示和图谱设置（“工具”>“图谱显示选项”）

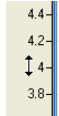
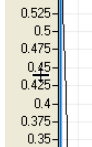
任务 2. 放大和缩小色谱图

在此任务中，您将熟悉“定性分析”程序的放大和缩小功能。

任务 2. 放大和缩小色谱图

步骤	详细说明	注释
1 在练习中，将仅放大和缩小三个色谱图中的一个（X 轴和 Y 轴）。 - 隐藏其他色谱图。 - 将最后一个峰放大两倍。 - 通过对 Y 轴自动定标再放大一倍。 - 缩小一倍，回到以前的缩放位置。 - 完全缩小到原始色谱图。	a 清除“数据浏览器”窗口中与要隐藏的色谱图对应的复选框。 b 单击鼠标右键并拖动到最后一个峰的某个区域之上。 确保没有针对此步骤选择在缩放期间对 Y 轴自动定标图标 。 c 重复步骤 b。 d 单击工具栏中的在缩放期间对 Y 轴自动定标图标 。 e 再次单击鼠标右键并第三次拖动到最后一个峰的某个区域之上。 “质量分析”程序会将 Y 轴自动定标到该范围的最大点。 f 单击取消缩放图标  以撤消上次执行的缩放操作。 您可以撤消过去的十五项缩放操作。 g 单击对 X 轴和 Y 轴自动定标图标  以完全缩小。	- 如果没有在“数据浏览器”窗口中选中某条线，则“定性分析”程序的任何其他窗口中都不会显示该信息。您只需在“数据浏览器”窗口中标记该线，其他窗口中将再次显示该信息。 - 您还可以对“质谱图预览”窗口、“MS 质谱图结果”窗口、“解卷积结果”窗口（如果安装了 BioConfirm 程序）以及“UV 结果”窗口中的质谱图使用这些缩放功能。 - 所选图标的背景颜色为橙色。

任务 2. 放大和缩小色谱图（续）

步骤	详细说明	注释
2 练习分别对每个轴进行放大和缩小。 - 仅沿 X 轴放大。 提示：右键单击 X 轴值，并从左向右移动光标。 - 部分缩小 X 轴。 提示：沿相反方向移动光标。 - 完全缩小 X 轴。 - 对 Y 轴重复前面的步骤。	a 要放大 X 轴，请将光标移到 X 轴值，直到出现水平双箭头。 b 单击鼠标右键并在 X 轴值中将新的光标从左侧拖动到右侧。 c 要缩小 X 轴，请单击鼠标右键并在 X 轴值中从右侧拖动到左侧。 d 单击 对 X 轴自动定标图标  完全缩小 X 轴。	 水平双箭头  右键单击 X 轴值时，将出现新的光标。
	a 要放大 Y 轴，请将光标移到 Y 轴值，直到出现垂直双箭头。 b 单击鼠标右键并在 Y 轴值中将新的光标从底部拖动到顶部。 c 要缩小 Y 轴，请单击鼠标右键并在 Y 轴值中从顶部拖动到底部。 d 单击 对 Y 轴自动定标图标  完全缩小 Y 轴。	 垂直双箭头  右键单击 Y 轴值时，将出现新的光标。

任务 3. 锚定色谱图

在此任务中，您可以锚定色谱图。如果锚定了一个色谱图，则在滚动浏览其他色谱图来显示这些色谱图时，锚定的色谱图将永久位于显示屏中。

任务 3. 锚定色谱图

步骤	详细说明	注释
• 锚定色谱图。 • 显示所有三个色谱图。 • 确保将色谱图查看列表设置为 1。 • 在“色谱图结果”窗口中，选择第二个 TIC。 • 锚定此 TIC。 • 滚动浏览色谱图。 • 清除锚。	a 在“数据浏览器”中，标记与在以前的任务中隐藏的色谱图对应的复选框。 b 确保在“色谱图结果”窗口中将窗格的最大数目设置为 1。 c 在“色谱图结果”窗口中，选择第二个 TIC。 d 在该色谱图中单击鼠标右键，然后单击设置锚。 e 使用“色谱图结果”窗口中的滚动条滚动浏览色谱图列表。第二个 TIC 始终处于可见状态。 f 单击色谱图 > 清除锚。	• 为色谱图设置锚时，一个锚图标将出现在“数据浏览器”中的锚定色谱图名称的旁边。 • 锚定一个色谱图后，“色谱图结果”窗口中将出现两个色谱图，即使查看列表显示 1 时也是如此。现在，这意味着除了锚定的色谱图以外，您还可以查看另一个色谱图。 • 此外，您还可以右键单击该色谱图，然后单击快捷菜单中的清除锚。

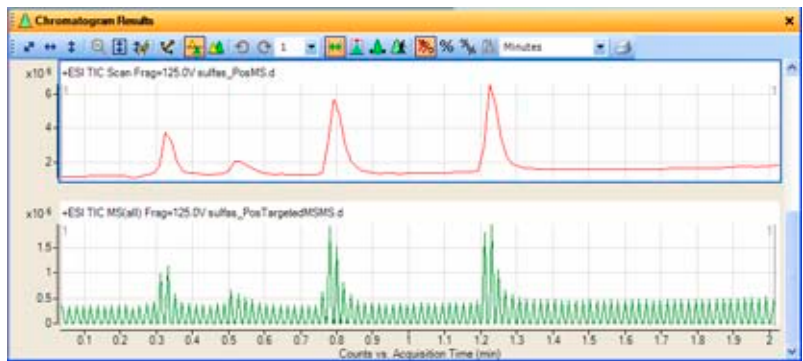


图 4 锚定的 TIC

任务 4. 更改窗口布局

在此任务中，您可以在主视图中移动窗口并创建多个窗口布局。

任务 4. 更改窗口布局

步骤	详细说明	注释
1 更改窗口布局： - 更改窗口大小。 - 保存窗口布局。 - 解除布局锁定。 - 将“色谱图结果”窗口更改为浮动状态。 - 移动“色谱图结果”窗口。 - 显示用于重新定位窗口的工具。	- 要更改窗口的大小，请在窗口之间拖动边界。 - 要保存窗口布局，请单击查看 > 窗口布局 > 保存布局。 - 要解除布局锁定，请单击查看 > 窗口布局 > 锁定布局。 - 为了使窗口浮动，请右键单击“色谱图结果”窗口的标题栏，然后单击快捷菜单中的浮动。 - 要移动窗口，请单击“色谱图结果”窗口的标题栏并将该窗口拖动到所需的位置。 - 要显示重新定位工具，请将该窗口拖动到某个其他窗口之上。当一个窗口与另一个窗口重叠时，该程序将显示多个布局工具，如图 5 所示。	- 如果解除布局锁定，则系统不会在“锁定布局”菜单中显示图标。 - 您只能在解除布局锁定时使用重新定位工具。 - 此外，通过双击窗口的标题栏，也可以使窗口浮动。 - 该软件创建了许多不同的布局。您还可以尝试调用不同的布局。 - 该软件具有四个不同的工作流程。每个工作流程调用的布局都不同。此外，切换到不同的工作流程时，布局也将随之更改。 - 如果安装了 BioConfirm 程序，则该程序也具有不同的工作流程和布局。

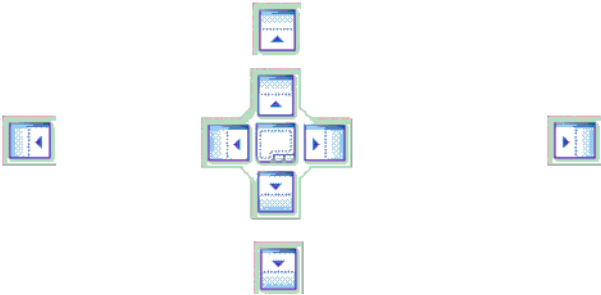


图 5 窗口重新定位工具

1 了解定性分析的基本知识

任务 4. 更改窗口布局

任务 4. 更改窗口布局（续）

步骤	详细说明	注释
2 重新定位“色谱图结果”窗口。 - 移动该窗口，使其依次位于其他窗口的顶部、左侧、右侧和底部。 - 同时移动两个窗口，使其中某个窗口位于另一个窗口的顶部，且只能通过底部的选项卡来使用。 - 恢复默认布局。	- 如果将光标拖动到某个较小的图标之上，则您正在拖动的窗口将被置于所有其他窗口的上方、右侧、下方或左侧。 - 将光标拖动到较大的图标上方。通过将光标拖动到较大图标的边缘上方，还可以将该窗口置于另一个窗口的上方、右侧、下方或左侧。 - 要将两个窗口一同显示在选项卡中，请将光标拖动到较大图标的中心上方。这两个窗口将一同显示在选项卡上，您将看到它们的副本。停止拖动鼠标。这两个窗口将一同显示在选项卡中。 - 单击查看 > 窗口布局 > 恢复默认布局。	- 光标必须位于框中某个箭头上方才能执行重新定位。 - 单击恢复默认布局命令，可以恢复“常规”工作流程中使用的布局。如果使用的是其他工作流程，则需要调用在该工作流程中使用的布局。

任务 5. 打印分析报告

在本练习或下一个练习中执行任何任务之后，如果要打印分析报告，应使用下列说明。

分析报告可以包含提取和积分色谱图、提取质谱图、查找化合物、搜索数据库中的峰质谱图或根据峰质谱图生成分子式的结果。

任务 5. 打印分析报告

步骤	详细说明	注释
1 要更改分析报告选择，请执行下列操作：	a 在方法管理器中，单击常规 > 分析报告。 b 选中与要打印的任何其他选择对应的复选框。 c 清除不希望打印的任何色谱图和质谱图选项。	• 分析报告仅包含在此部分中标记的信息。 • 此外，如果某些结果不可用，则不会包括这些结果，即使这些结果已在此部分中进行标记时也是如此。例如，如果您尚未对色谱图进行积分，则峰表不会包含在内。

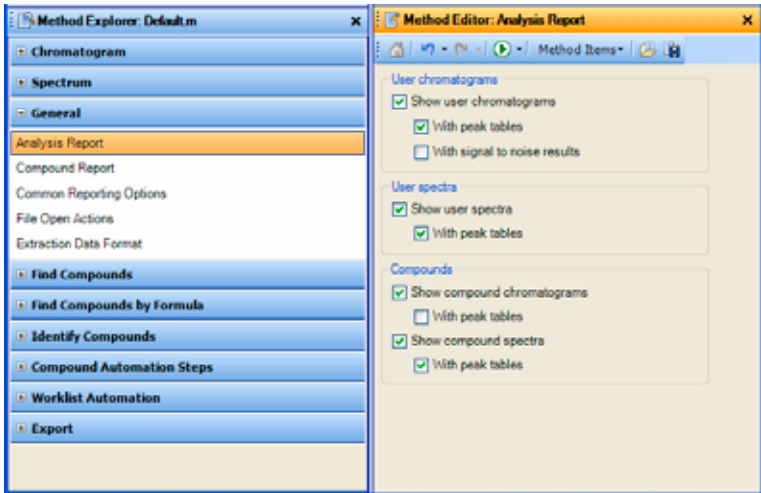


图 6 方法编辑器中的“分析报告”窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 5. 打印分析报告

任务 5. 打印分析报告（续）

步骤	详细说明	注释
2 打印该报告。	- 您可以采用下列多种方式交互性地打印该报告： - 在主菜单中，单击文件 > 打印 > 分析报告。 - 在主工具栏中，单击“打印机”图标。 - 单击方法编辑器工具栏中的打印分析报告图标 。 - 右键单击方法编辑器中的“分析报告”部分，然后单击打印分析报告。 - 在“数据浏览器”中的数据文件快捷菜单中，单击打印分析报告。	有时，可以使用方法编辑器工具栏中的“运行”图标  从一组可能的操作中选择一项操作。例如，如果切换到“常规”>“公用报告选项”部分，则单击“运行”图标时可能会执行四项不同的操作。如果单击箭头，系统会显示可能操作的列表，您可以从中选择要执行的操作。如果从列表中选择其他操作，则会更改默认操作。如果只单击“运行”按钮，则系统将执行默认操作。

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

使用来自 TOF 仪器的 MS 数据以及来自 Q-TOF 仪器的 MS-only 数据执行下列任务。

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS）

在此任务中，您可以从原始 TIC 提取并合并色谱图。

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 从 sulfas-PosMS.d 数据文件中的两个质量中提取并合并所提取的离子色谱图 (EIC)。 - m/z 值为 279.09102 和 311.08085。 - 将各个质量中的峰合并到一个色谱图中。	a 在“数据浏览器”窗口中，清除与 sulfas-PosMS.d 以外的数据文件对应的复选框。 b 使用下列选项或右侧的选项之一，打开“提取色谱图”对话框： 单击色谱图 > 提取色谱图。 c 在已打开的数据文件列表中，单击 sulfas-PosMS.d。 d 在类型列表中，单击 EIC。 e 在 m/z 值 字段中，键入 279.09102, 311.08085。 f 选中将多个质量合并到一个色谱图中复选框以合并这些 EIC。 g 单击确定。 h 确保将“色谱图结果”工具栏中的最大列表窗格数设置为 3。	- 您还可以采用下列方法之一来提取色谱图： - 在色谱图中单击鼠标右键，然后单击提取色谱图。 - 在“数据浏览器”中，高亮显示与 sulfas_PosMS.d 对应的 TIC 扫描，然后右键单击 TIC 扫描并单击提取色谱图。 - 您可以对“全部”或“MS”使用 MS 级别。 - 请注意，您还可以选择在提取后对提取的色谱图自动进行积分。 - 也可以从质谱图中提取色谱图。

1 了解定性分析的基本知识

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS）

任务 6. 提取色谱图（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----

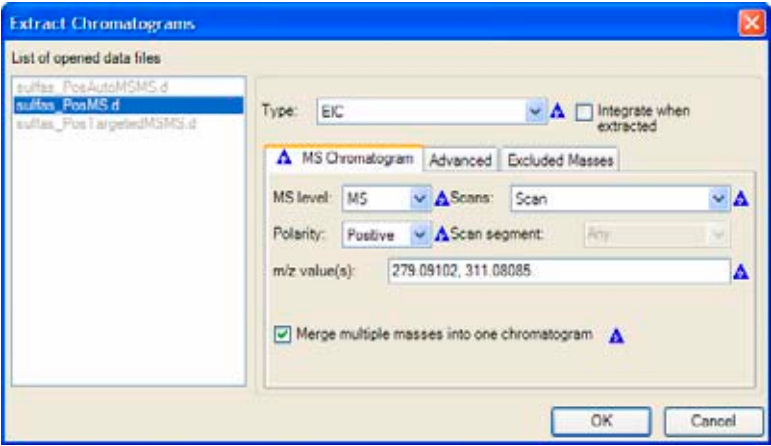


图 7 “提取色谱图”对话框。

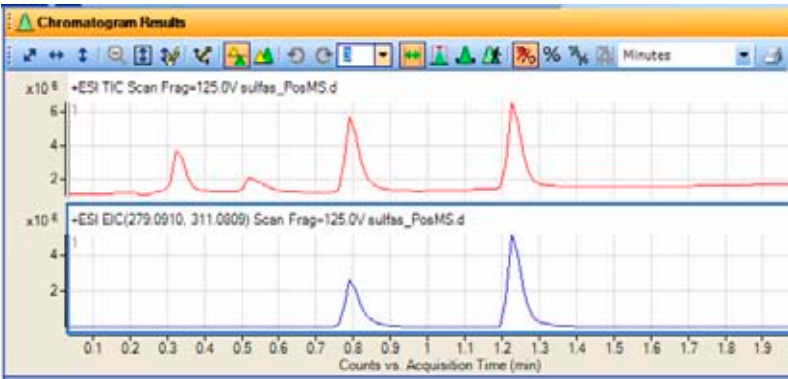


图 8 合并后的提取离子色谱图 (EIC)（与原始 TIC 比较）

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）

在此任务中，您将学习用于对色谱图进行交互式积分、更改积分参数从而修改结果，以及查看每个峰的信噪比的不同方法。

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任意选项对 sulfas_PosMS.d TIC 色谱图进行积分。	- 使用下列任一选项，对 sulfas_PosMS.d 色谱图进行积分。 - 在主菜单中，单击色谱图 > 对色谱图积分。 - 高亮显示该色谱图。然后，右键单击该色谱图，并单击对色谱图积分。 - 在“数据浏览器”中，高亮显示 sulfas_PosMS.d > 用户色谱图 部分中的 TIC 扫描。然后，右键单击“TIC 扫描”，并单击对色谱图积分。	- 积分使用“常规积分器”，因为这是在方法 default.m 中选择的积分器，您可以在“色谱图”>“积分 (MS)”>“积分”选项卡中更改此值。 - 请注意，带有默认参数的积分检测的是非常小的峰。

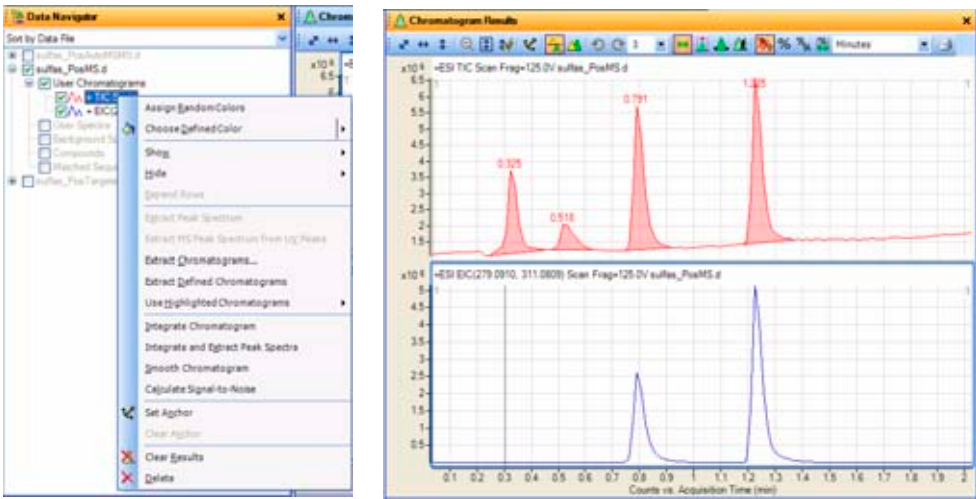


图 9 “数据浏览器”中的快捷菜单以及积分的 sulfas_PosMS.d TIC 色谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 对任务 1 中的提取的离子色谱图 (EIC) 进行积分。	在 EIC 窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击对色谱图积分。	通常，在设置提取时，您会选中“提取色谱图”对话框中的“提取时积分”复选框。
3 更改积分 TIC 的过滤器参数。 - 为 MS 数据显示方法管理器中的“积分方法编辑器”窗口。 - 更改阈值以便仅保留两个最大的峰。	- a 在方法管理器中，单击色谱图 > 积分 (MS) 以显示“积分器”选项卡。 - b 单击峰过滤器选项卡。 - c 在“最大峰数”下，标记上限（按峰高）（如有必要），并键入 2。 - d 单击“数据浏览器”窗口中的TIC 扫描。	请注意根据以当前方法保存的值更改设置时出现的蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

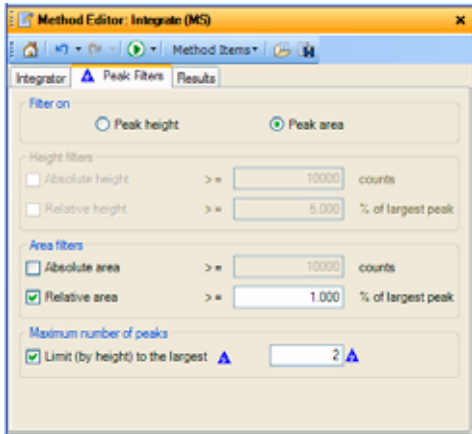


图 10 标记了上限（按峰高）的“峰过滤器”选项卡

4 对色谱图重新积分。	单击方法编辑器工具栏中的对色谱图积分图标 ，以便使用新设置进行积分。	请注意，现在仅对两个最大的峰进行积分。
-------------	--	---



图 11 阈值设置较高的积分结果

任务 7. 对色谱图进行交互式积分（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
5 计算信噪比。 - 选择 sulfas_PosMS.d TIC。 - 将色谱图峰的第一个峰标签设置为面积，将第二个峰标签设置为信噪比。 - 打开“方法编辑器”。 - 使用 0.63 – 0.73 表示噪音区域，并计算积分峰的信噪比。	- a 单击工具 > 图谱显示选项。 - b 单击“色谱图”选项卡。 - c 将第一组峰标签设置为面积，将第二组峰标签设置为信噪比。 - d 单击确定。 - e 在方法管理器中，单击色谱图 > 计算信噪比。 - f 为噪音区域键入 0.63 – 0.73，并单击计算信噪比图标 。	• 确保在计算信噪比之前高亮显示 TIC。 • 指定为噪音区域的面积在“色谱图结果”窗口中以粗体形式绘制。



图 12 具有“面积”和“信噪比”标签的积分 TIC

6 恢复默认方法的设置，并关闭方法编辑器。	- a 要取消所做更改并恢复默认方法中的值，请单击方法编辑器工具栏中的恢复到上次在文件中保存的值图标 . - b 关闭方法编辑器。	
7 使峰标签返回“保留时间”。	- a 单击工具 > 图谱显示选项。 - b 单击“色谱图”选项卡。 - c 将第一个峰标签设置为保留时间，将第二个峰标签设置为无。 - d 单击确定。	

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）

在此任务中，您可以从色谱图中指定的确切位置提取质谱图。您可以指定定性分析程序从特定数据点提取质谱图或从多个数据点或范围的平均值中提取平均质谱图。

此外，此任务还可向您显示如何更改质谱图显示选项并扣除背景质谱图。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 在位于 0.79 分钟处的峰上和 sulfas_PosMS.d 数据文件的最后一个峰的特定数据点上提取质谱图。 - 放大 0.7 与 1.0 分钟之间的区域后，请使用“注释”下介绍的任一选项从处于或接近 0.79 分钟处的峰中提取质谱图。 - 打开“质谱图预览”。 - 放大 1.1 与 1.4 分钟之间的区域后，请从处于或接近 1.22 分钟的峰中提取质谱图。 - 将此质谱图复制到“用户质谱图”部分。 - 更改显示，使得至少显示两个质谱图。	a 要放大到第一个峰，请在 0.70 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 1.0 分钟处的曲线下方，然后松开鼠标。 b 在接近 0.79 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取质谱图。 c 单击“色谱图结果”工具栏中的缩小图标 。 d 要打开“质谱图预览”窗口，请单击质谱图预览图标 。 e 放大到介于 1.1 与 1.4 分钟之间的区域。 f 在接近 1.22 分钟处的峰上，采用“注释”列中列出的任一方法提取质谱图。该质谱图将显示在“质谱图预览”窗口中。 g 右键单击该质谱图，然后单击复制到用户质谱图。此时不会关闭“质谱图预览”窗口。 h 如有必要，请单击“MS 质谱图结果”工具栏中的最大列表窗格数图标，然后单击“2”。	- 进行缩放时，请确保“在缩放期间对 Y 轴自动定标”图标  处于“打开”状态。该图标处于“打开”状态时，背景为橙色。 - 您可以采用下列任一方式来提取质谱图： - 双击该色谱图中的数据点。 - 单击该色谱图中的数据点，然后在该色谱图中的任意位置单击鼠标右键。单击提取 MS 质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。确保已选择 sulfas_PosMS.d 文件，然后单击提取。 - 请注意，在第一次提取质谱图时，将出现包含该质谱图的“MS 质谱图结果”窗口，并且该质谱图的类型和保留时间将出现在“数据浏览器”中的“用户质谱图”下。 - 启用“质谱图预览”时，系统将显示所有手动选择的质谱图，但不会将其保留在“用户质谱图”部分中。 - 当“质谱图预览”处于打开状态时，“定性分析”程序会在您提取新的质谱图时覆盖以前的质谱图。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）（续）



图 13 包含从 sulfas_PosMS.d 文件中的两个积分峰中提取的质谱图的主窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2	提取一个质谱图，并使用该质谱图对 sulfas_PosMS.d 数据文件的最后一个积分峰的某个指定范围内的所有点求平均值： - 删除所有现有的用户质谱图。 - 缩小该色谱图。 - 关闭“质谱图预览”窗口。 - 使用“色谱图”工具栏上的“范围选择”图标。 - 设置从峰左侧的中途点到峰右侧的同一个点之间的范围。 - 使用列出的任一选项提取该质谱图。	- 此外，还可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图。 - 您可以使用“消息框选项”对话框更改每次删除色谱图或质谱图时是否要求您进行确认。可通过运行工具 > 消息框选项命令来显示此对话框。 - 只有在调用多个数据文件时，才会显示“提取质谱图”对话框。

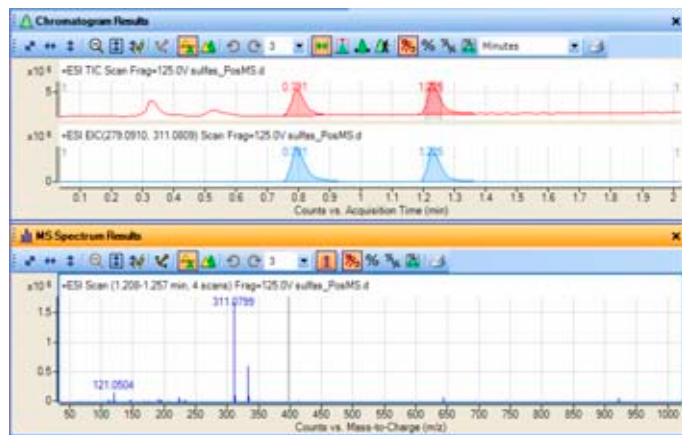


图 14 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
3	提取一个质谱图，并使用该质谱图对 sulfas_PosMS.d 数据文件中的积分峰 1 和 2 的范围一同求平均值。 - 提示：使用“范围选择”图标和 Ctrl 键可以选择从中途点获取的峰 1 范围。 - 使用右侧的任一选项提取该质谱图。	- 请记住，第二个峰已具有从步骤 2 中选定的范围。 - 此外，通过右键单击色谱图中的任意位置，然后单击提取 MS 质谱图，也可以提取质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。单击提取。

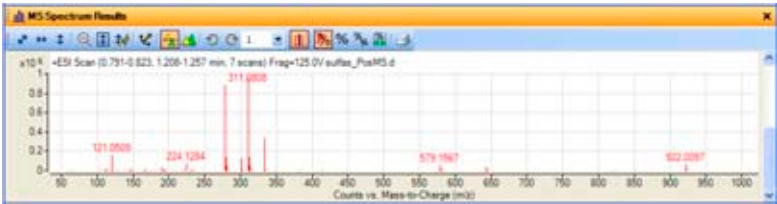
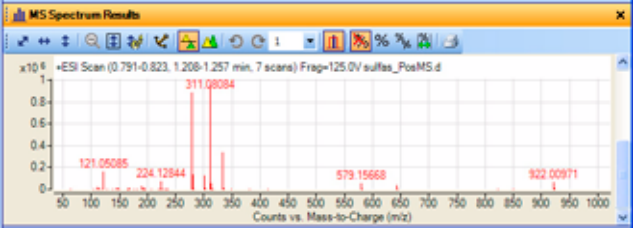


图 15 从多个范围创建的平均质谱图。

1 了解定性分析的基本知识

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4 更改 sulfas_PosMS.d 的质谱图显示选项。	a 单击工具 > 图谱显示选项。 b 单击MS 和 MS/MS 质谱图选项卡。 c 将小数点后的位数设置为大于 m/z 值的当前设置的值。 d 单击确定。	• 请注意，该标签现在显示的 m/z 多一位数字。
		
	e 重复步骤 a 和 b，然后将小数点后的位数设置为小于当前设置的值。 f 单击确定。	• 该标签现在应显示原始位数。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
5 每次在 sulfas_PosMS.d 中提取峰质谱图时都扣除背景质谱图。 - 删除“数据浏览器”中“用户质谱图”下的所有扫描。 - 在 0.0 到 0.25 分钟的区域内提取一个背景质谱图，并使其出现在“数据浏览器”的“背景质谱图”文件夹中。 - 使用当前的背景 MS 质谱图进行扣除。 - 对色谱图进行积分，将积分峰数目限制为 4 个。 - 从第三个积分峰中提取峰质谱图。	a 在“数据浏览器”中的用户质谱图下，高亮显示要删除的用户质谱图（使用 Ctrl）。 b 右键单击该质谱图，然后单击删除。 c 单击是。 d 确保范围选择图标在“色谱图结果”工具栏中处于选中状态，并在 0.0 与 0.25 分钟之间拖动光标。 e 在该范围内单击鼠标右键，然后单击将 MS 质谱图提取到背景。 f 在方法管理器中，单击质谱图 > 提取 MS。 g 单击手动提取选项卡。 h 在手动质谱图背景下，为 MS 质谱图选择当前背景质谱图。 i 在方法管理器中，单击色谱图 > 积分 (MS)。 j 单击峰过滤器选项卡。 k 选中上限（按峰高）复选框，并键入 4。 l 在主菜单中，单击色谱图 > 对色谱图积分 > 整个色谱图。 m 单击“色谱图结果”工具栏中的峰选择图标。 n 选择第三个积分峰，并提取峰质谱图。	• 请注意，在此过程结束时，所有提取的峰质谱图都会自动扣除指定的背景质谱图。 • 以下步骤可用作将背景质谱图移动到“背景质谱图”文件夹中的替代方式： • 双击选定范围以提取平均的质谱图。 • 在质谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击移动到背景质谱图。

任务 8. 从色谱图中提取质谱图 (仅限用于 MS)

任务 8. 从色谱图中提取质谱图 (仅限用于 MS) (续)

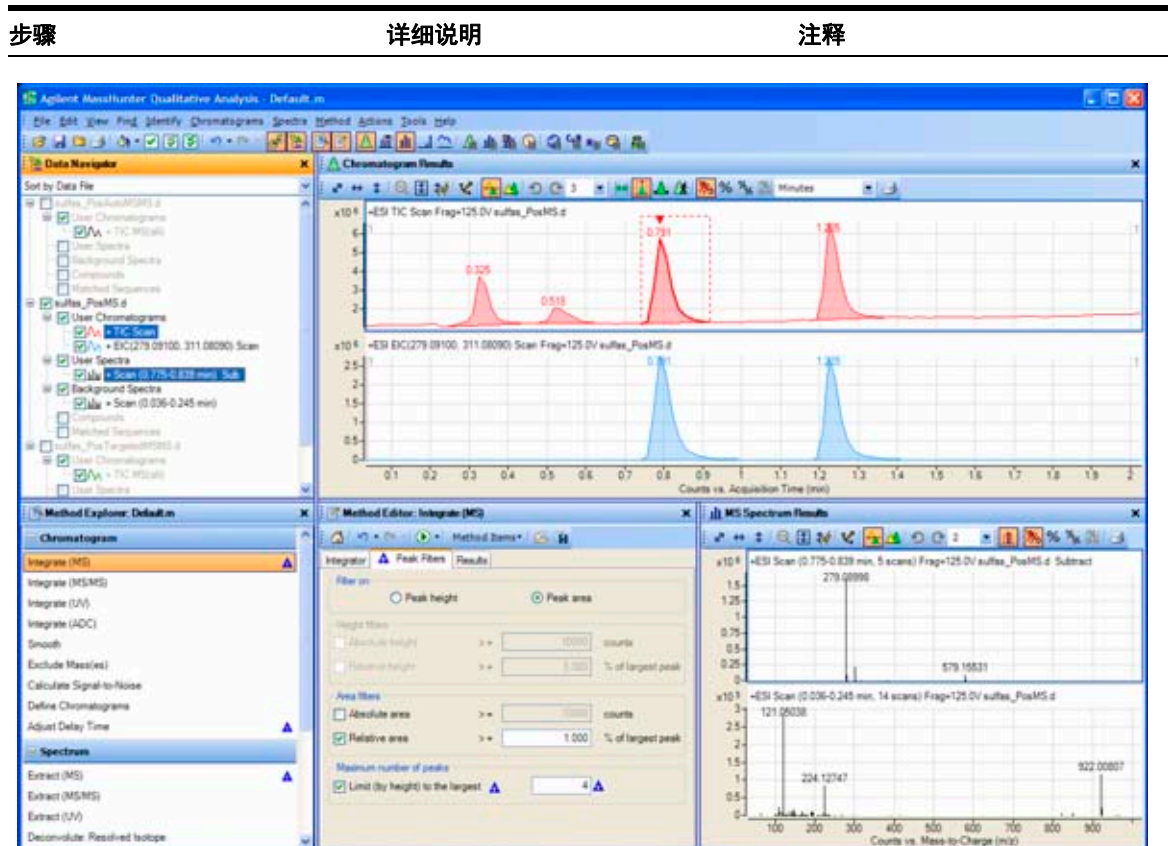


图 16 扣除背景的质谱图

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 和三重四极杆质谱仪）的任务

任务 9. 提取色谱图（MS 和 MS/MS）

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

任务 9. 提取色谱图（MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 在 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件中提取 MS 数据的 TIC。	a 标记与 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件对应的行，并清除其他数据文件。 b 使用下列选项或右侧的选项之一，显示“提取色谱图”对话框： 单击色谱图 > 提取色谱图。 c 在已打开的数据文件列表中，单击 sulfas_PosTargetedMSMS.d（如有必要）。 d 确保类型为 TIC。 e 在“MS 级别”列表中，单击 MS。 f 单击确定。	您还可以采用下列方法之一来提取色谱图： 在色谱图中单击鼠标右键，然后单击提取色谱图。 在“数据浏览器”中，单击用户色谱图 > TIC MS（全部），然后右键单击 TIC MS（全部），并单击提取色谱图。 还可以从质谱图中提取色谱图。

1 了解定性分析的基本知识

任务 9. 提取色谱图 (MS 和 MS/MS)

任务 9. 提取色谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
----	------	----

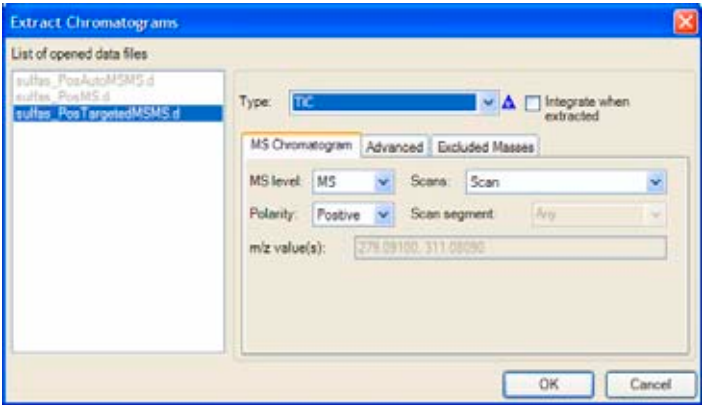


图 17 “提取色谱图”对话框。

- 2 提取另一个色谱图，但要根据 MS/MS 数据的产物离子进行提取。
- 这次，请选择对提取的色谱图进行积分。
- a 重复步骤 1 中的步骤 b-c。
- b 单击 **EIC** 作为“类型”。
- c 在 **MS 级别** 列表中，单击 **MS/MS**。
- d 在“扫描”列表中，单击 **产物离子**。
- e 在“前级离子 m/z”中，单击“279.09100”。
- f 在 m/z 值文本框中，键入 186.03299。
- g 选中 **提取时积分** 复选框。
- h 单击 **确定**。
- 在 m/z 值文本框中，您还可以键入范围（例如 100 - 300）

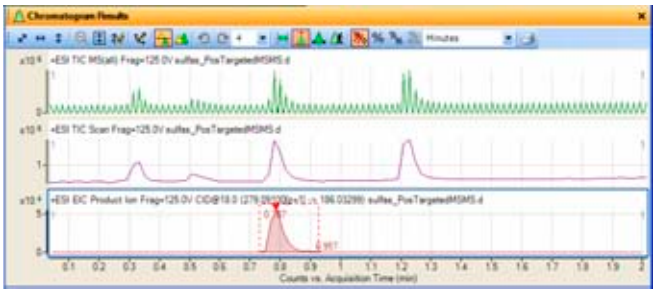


图 18 MS 的 TIC 和 MS/MS 数据的 EIC（与原 TIC 比较）

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS）

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

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

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任一选项，对 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的“TIC 扫描”色谱图进行积分。	a 高亮显示“TIC 扫描”色谱图，并从下列任一命令中进行选择以便对色谱图进行积分。 - 在菜单栏中，单击色谱图 > 对色谱图积分。 - 在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击对色谱图积分。 - 在“数据浏览器”窗口中，选择 sulfas_PosTargetedMSMS.d > 用户色谱图 > TIC 扫描，然后右键单击“TIC 扫描”并单击对色谱图积分。	- 请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。 - 您可以选择要对“方法编辑器”窗口中的 MS 数据、MS/MS 数据、UV 数据以及 ADC 数据使用的积分器。
2 更改阈值，减少要进行积分的峰的数量。 - 为 MS 数据显示方法管理器中的“积分方法编辑器”窗口。 - 更改阈值以便仅保留两个最大的峰。	a 在方法管理器中，单击色谱图 > 积分 (MS) 以显示“积分器”选项卡。 b 单击峰过滤器选项卡。 c 在“最大峰数”框中，标记上限（如有必要），并键入 2。	请注意根据以当前方法保存的值更改设置时出现的蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

1 了解定性分析的基本知识

任务 10. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 MS/MS)

任务 10. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
----	------	----

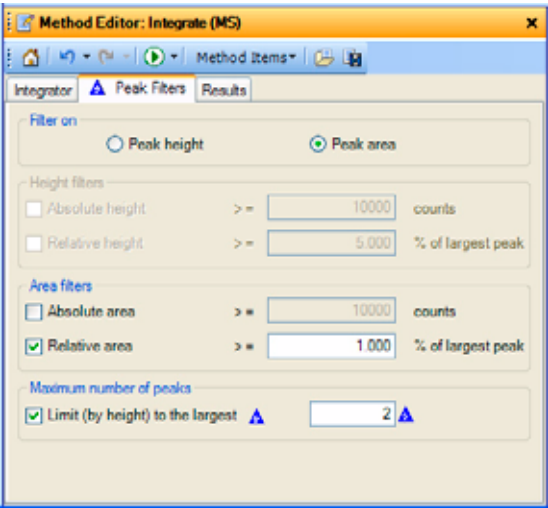


图 19 标记了上限 (按峰高) 的“峰过滤器”选项卡

3 对色谱图重新积分

- d 单击 “方法编辑器” 工具栏中的  按钮，以便使用新设置进行积分。 • 请注意，现在仅对两个最大的峰进行积分。

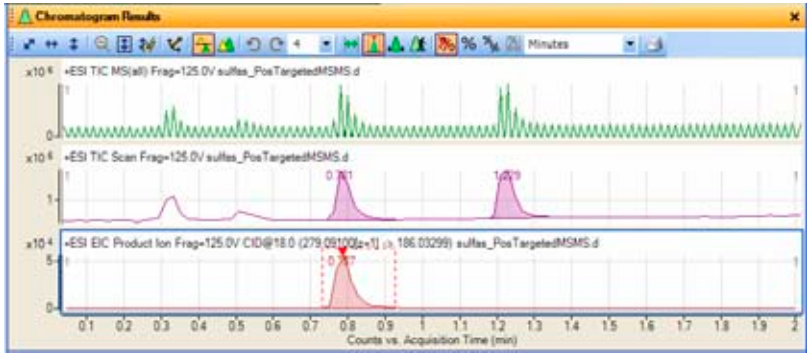


图 20 使用较高的阈值设置对 TIC MS 和 MS/MS 色谱图进行积分

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4 使用右侧列出的任一选项，对 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的“EIC 产物离子”色谱图进行积分。	a 高亮显示“EIC 产物离子”色谱图，并从下列任一命令中进行选择以便对色谱图进行积分。 - 在菜单栏中，单击色谱图 > 对色谱图积分。 - 在色谱图窗口中的任意位置单击鼠标右键，然后单击对色谱图积分。 - 在“数据浏览器”窗口中，选择 sulfas_PosTargetedMSMS.d > 用户色谱图 > EIC 产物离子，然后右键单击 EIC 产物离子 并单击对色谱图积分。	- 请注意，该程序实际上已对色谱图中的所有峰进行了积分。 - 您可以选择要对“方法编辑器”窗口中的 MS 数据、MS/MS 数据、UV 数据以及 ADC 数据使用的积分器。
5 将过滤器更改为按峰高过滤。 - 为 MS/MS 数据显示方法管理器中的“积分方法编辑器”窗口。 - 将“过滤”值更改为峰高 - 选中绝对峰高复选框。	a 在方法管理器中，单击色谱图 > 积分 (MS/MS) 以显示“积分器”选项卡。 b 单击峰过滤器选项卡。 c 在过滤下，单击峰高。 d 在“峰高过滤器”下，标记绝对峰高复选框。	请注意根据以当前方法保存的值更改设置时出现的蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。
6 对色谱图重新积分	e 单击“方法编辑器”工具栏中的  按钮，以便使用新设置进行积分。	请注意，现在仅对最大的峰进行积分。

1 了解定性分析的基本知识

任务 10. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 MS/MS)

任务 10. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
----	------	----

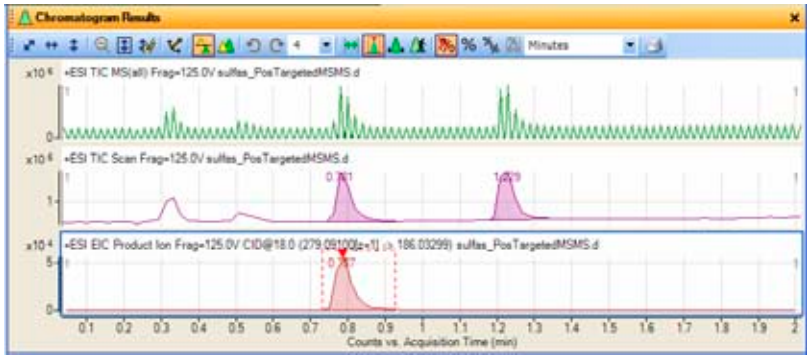


图 21 使用较高的阈值设置对 TIC MS 和 MS/MS 色谱图进行积分

- 7 计算产物离子 EIC 的信噪比。
- 将色谱图峰的第一个峰标签设置为**面积**，将第二个峰标签设置为**信噪比**。
 - 打开“方法编辑器”。
 - 使用 0.0 - 0.76 表示噪声区域，并计算积分峰的信噪比。
- a 单击**工具 > 图谱显示选项**，并将第一个峰标签设置为**面积**，将第二个峰标签设置为**信噪比**。
- b 在“色谱图”部分的方法管理器中，单击**计算信噪比**。
- c 为噪声区域键入 0.0 - 0.76，并单击**计算信噪比**图标
- 确保在计算信噪比之前高亮显示 TIC。
 - 指定为噪声区域的面积在“色谱图结果”窗口中以粗体形式绘制。

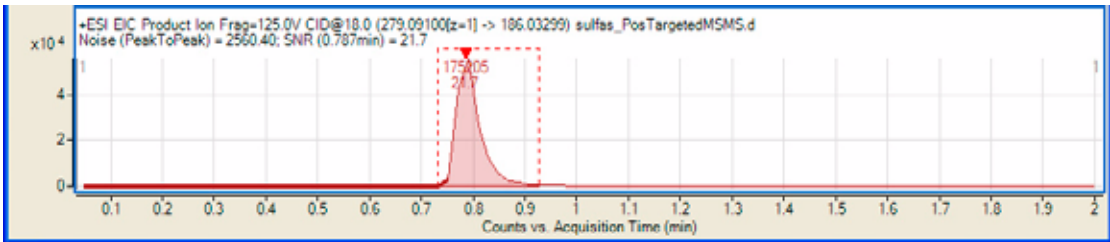


图 22 MS/MS 产物离子的信噪比结果

任务 10. 对色谱图进行交互式积分（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
8 恢复为当前方法保存的设置并关闭“方法编辑器”。	a 单击方法管理器中的“色谱图”>“计算信噪比”部分。 b 单击方法编辑器工具栏中的恢复到上次在文件中保存的值图标 。 c 单击方法管理器中的“色谱图”>“积分 (MS/MS)”部分。 d 单击图标 。 e 单击方法管理器中的“色谱图”>“积分 (MS)”部分。 f 单击图标 。 g 关闭方法编辑器。	• 要取消所做更改并恢复调用方法中的值，请单击方法编辑器工具栏中的恢复到上次在文件中保存的值图标 。
9 使峰标签返回“保留时间”。	a 单击工具 > 图谱显示选项。 b 将第一个峰标签设置为保留时间，将第二个峰标签设置为无。 c 单击确定。	
10 删除原始色谱图以外的所有色谱图。	a 在“用户色谱图”下，高亮显示原始色谱图以外的所有色谱图。 b 右键单击高亮显示的色谱图，然后单击删除。	

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）

在此任务中，您可以从色谱图中指定的确切位置提取质谱图。您可以指定定性分析程序从特定数据点提取质谱图或从多个数据点或范围的平均值中提取平均质谱图。

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

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 浏览色谱图，以查看 sulfas_PosTargetedMSMS.d 的最后一个峰的前级离子和产物离子。 - 放大 1.15 与 1.35 分钟之间的区域。 - 使用“行走色谱”图标。 - 查看从大约 1.15 分钟处开始的质谱图，并向右侧移动箭头。	a 单击“数据浏览器”窗口中的“TIC MS（全部）”色谱图。 b 要放大到最后一个峰，请在 1.15 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 1.35 分钟处，然后松开鼠标。 c 单击“色谱图结果”工具栏中的行走色谱图标 . d 将“行走色谱”光标移动到 X 轴上方大约 1.15 分钟处，然后单击。 e 要在质谱图之间导航，请使用键盘上的左右箭头键。	“行走色谱”工具对于 MS/MS 数据特别有用，可用于识别前级离子和产物离子。 - 在“色谱图结果”窗口中单击的每个点的质谱图都会自动显示在“质谱图预览”窗口（该窗口会自动打开）中。

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----

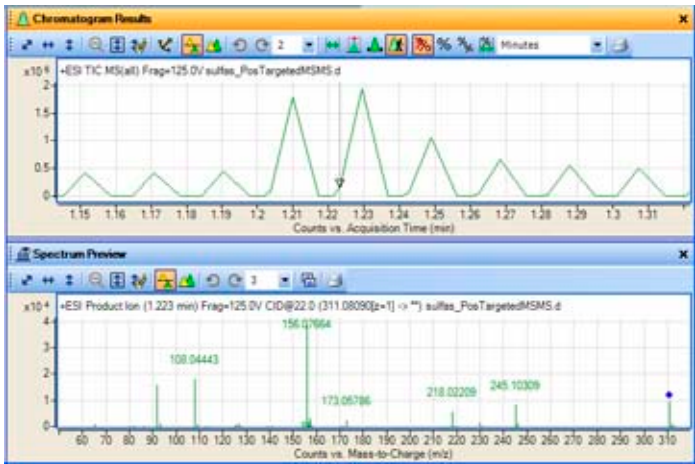


图 23 浏览色谱图以查看 1.223 分钟处的背景所对应的 MS/MS 和产物离子。

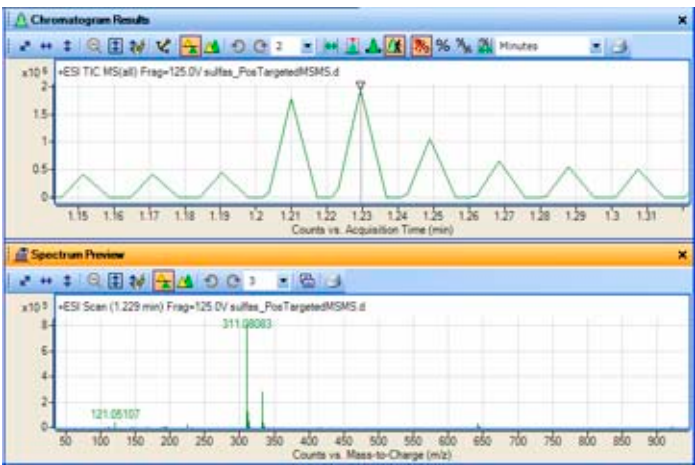


图 24 浏览色谱图以查看 1.229 分钟处的峰所对应的 MS 扫描

1 了解定性分析的基本知识

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS)

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
2 在 0.33 分钟处的峰和 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据的最后一个峰的特定数据点上提取质谱图。 - 放大 0.3 与 0.4 分钟之间的区域后, 请从位于或接近 0.33 分钟处的某个峰 (MS) 中提取一个质谱图, 然后使用 “注释” 下介绍的任一选项提取一个峰谷 (MS/MS)。 - 放大 1.15 与 1.25 分钟之间的区域后, 请从位于或接近 1.23 分钟处的某个峰 (而不是峰谷) 中提取一个质谱图。 - 更改显示, 使得至少显示三个质谱图。	a 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 范围选择 图标 。 b 关闭 “质谱图预览” 窗口。 c 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 缩小 图标 。 d 要放大到第一个峰, 请在 0.3 分钟处的峰上方单击鼠标右键, 并将其拖动到 0.4 分钟处, 然后松开鼠标。 e 在接近 0.33 分钟处的峰上, 采用 “注释” 列中列出的任一方法提取一个质谱图。 f 在接近 0.34 分钟处的峰谷上, 提取质谱图。 g 单击 “色谱图结果” 工具栏中的 缩小 图标 。 h 放大到介于 1.15 与 1.25 分钟之间的区域。 i 在接近 1.23 分钟处的峰上, 采用 “注释” 列中列出的任一方法提取一个质谱图。(请不要提取峰谷质谱图。) j 如有必要, 请单击 “MS 质谱图结果” 工具栏中的 最大列表窗格数 图标, 然后单击 “3”。	- 进行缩放时, 请确保 “在缩放期间对 Y 轴自动定标” 图标  处于 “打开” 状态。该图标处于打开状态时, 背景为橙色。 - 您可以采用下列任一方式来提取质谱图: - 双击该色谱图中的数据点。 - 单击该色谱图中的数据点, 然后在该色谱图中的任意位置单击鼠标右键。单击 提取 MS 质谱图。此时将显示 “提取质谱图” 对话框。确保选中 sulfas_PosTargetedMSMS.d 文件, 然后单击 “提取质谱图” 对话框中的 提取。 - 请注意, 在第一次提取质谱图时, 将出现包含该质谱图的 “MS 质谱图结果” 窗口, 并且该质谱图的类型和保留时间将出现在 “用户质谱图” 下。所有后续提取的质谱图也都将出现在两个位置。

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）（续）

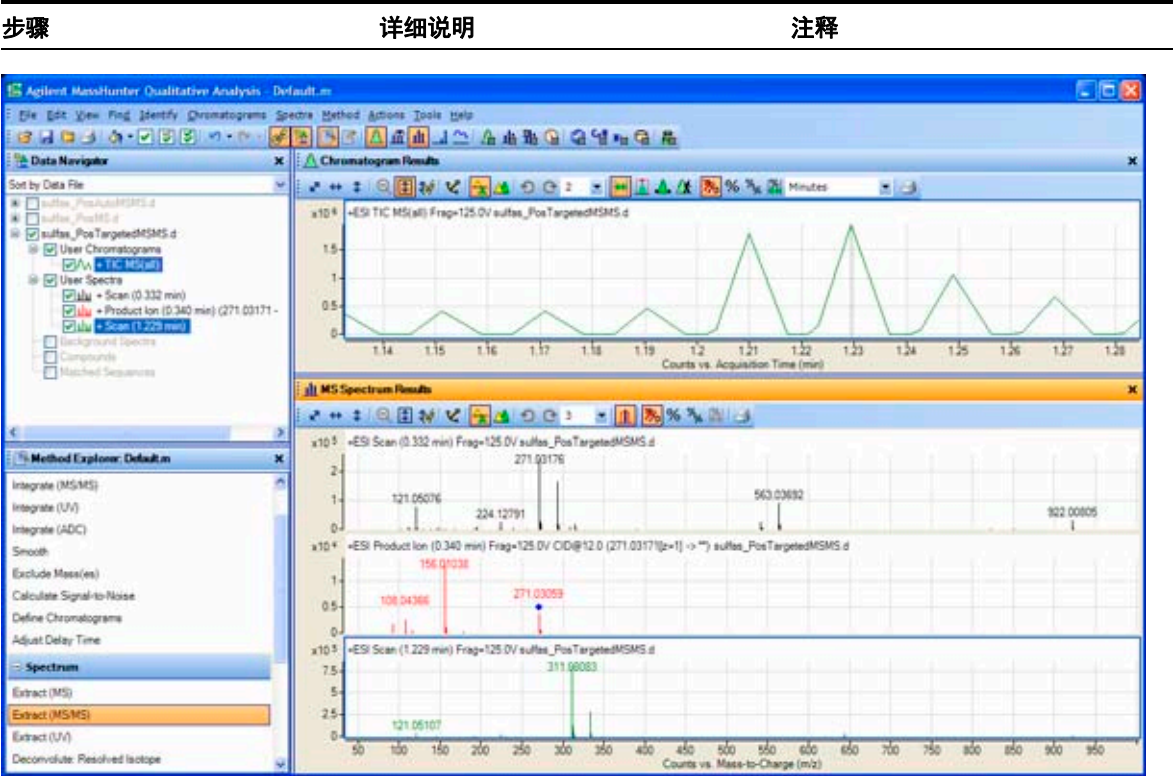


图 25 包含第一个峰的“MS 扫描”和产物离子质谱图以及最后一个峰的“MS 扫描”质谱图的主窗口

1 了解定性分析的基本知识

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS)

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
3 为 sulfas_PosTargetedMSMS.d 数据文件的最后一个峰提取一个产物离子质谱图。	a 单击质谱图预览图标 。 b 在接近 1.23 分钟处的峰谷上，提取一个质谱图。 c 右键单击“质谱图结果”窗口中的质谱图，然后单击复制到用户质谱图。 “质谱图预览”窗口位于“MS 质谱图结果”窗口下方。 d 单击质谱图窗格列表旁边的下箭头，然后单击“4”。 e 关闭“质谱图预览”窗口。	• 启用“质谱图预览”时，系统将在“质谱图预览”窗口（而不是“数据浏览器”的“用户质谱图”部分）中显示所有手动选择的质谱图。 • 当“质谱图预览”处于打开状态时，“定性分析”程序会在您提取新的质谱图时覆盖以前的质谱图。 • 如果要快速查看色谱图中的质谱图并且仅保存若干质谱图，则“质谱图预览”模式将非常有用。

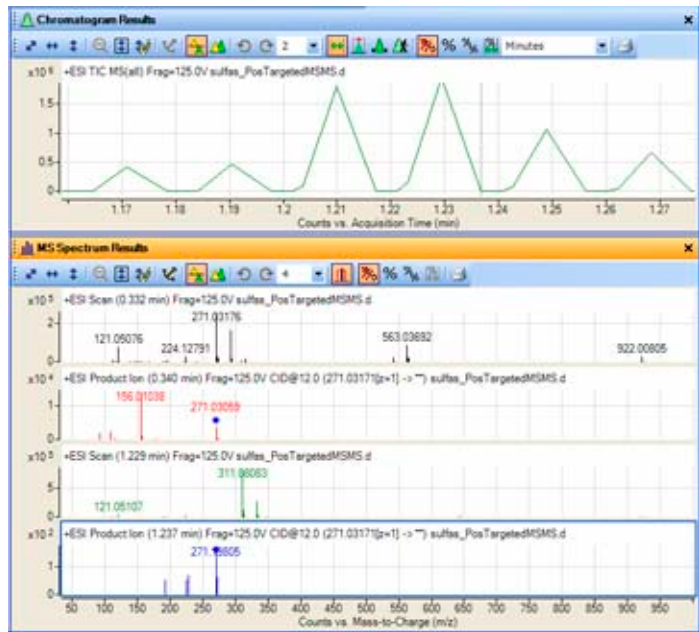


图 26 包含色谱图中的最后一个峰的产物离子质谱图的主窗口

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4	提取一个质谱图，并使用该质谱图对 sulfas_PosTargeted.d 数据文件的最后一个峰的某个指定范围内的所有点求平均值： - 缩小。 - 使用“色谱图”工具栏上的“范围选择”图标。 - 设置跨越整个峰的范围。 - 使用列出的任一选项提取该质谱图。 a 单击“色谱图结果”工具栏中的对 X 轴和 Y 轴自动定标图标  以完全缩小。 b 单击“色谱图”工具栏上的范围选择图标 。 c 在最后一个峰的大约 1.15 分钟处单击并拖动到右侧大约 1.25 分钟处。 d 使用右侧的某个选项提取平均质谱图。 e 单击质谱图窗格列表旁边的下箭头，然后单击“2”。	- 您可以通过双击色谱图中的选定范围来提取平均质谱图。 - 或者，在色谱图中的任意位置单击鼠标右键，然后单击快捷菜单中的提取 MS 质谱图。然后，单击提取。 - 请注意，平均 MS 质谱图和平均 MS/MS 质谱图将同时出现。

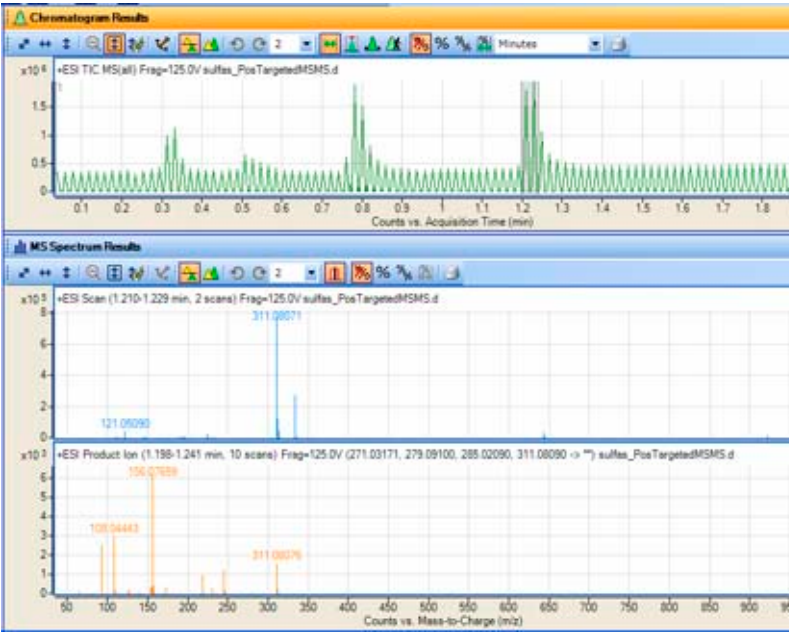


图 27 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS)

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
5 提取质谱图，并使用该质谱图对 sulfas_PosTargeted.d 数据文件中的峰 1 和 4 的范围一同求平均值。 - 提示：使用“范围选择”图标和 Ctrl 键可以选择从中途点获取的峰 1 范围。 - 使用右侧的任一选项提取该质谱图。	a 按住 Ctrl 键。 b 在第一个峰左侧大约 0.3 分钟处单击，并拖动到右侧大约 0.34 分钟处，然后松开鼠标。 c 松开 Ctrl 键。 d 使用此选项或右侧的选项提取平均质谱图。 在每个峰的选定范围内双击。	- 请记住，第二个峰已具有从步骤 4 中选定的范围。 - 要提取质谱图，还可以在色谱图中的任意位置单击鼠标右键并单击提取 MS 质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。单击提取。



图 28 根据多个范围创建的平均 MS 和 MS/MS 质谱图。

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
6 每次为从 sulfas_PosTargetedMSMS.d 中提取的 MS/MS EIC 提取峰质谱图时，都会扣除背景质谱图。 - 删除“数据浏览器”中“用户质谱图”下的所有扫描。 - 提取背景质谱图，该质谱图作为峰开始处的质谱图与峰结束处的质谱图的平均质谱图。 - 从积分峰中提取峰质谱图。	- a 在“数据浏览器”中的用户质谱图下方，右键单击相应质谱图，然后单击删除。 - b 单击是。 - c 提取 m/z 范围为 100-300 的离子 279.09100 的积分 MS/MS EIC (请参见第 35 页上的“任务 9. 提取色谱图 (MS 和 MS/MS)”) - d 在方法管理器中，单击质谱图 > 提取 (MS/MS)。 - e 单击峰质谱图提取 (MS/MS) 选项卡 (如果不可见)。 - f 在峰质谱图背景框中，单击在峰开始和结束处的质谱图的平均值。 - g 在“色谱图结果”工具栏中，单击峰选择图标。 - h 选择 0.8 分钟处的峰。 - i 单击鼠标右键，然后单击提取峰质谱图。	• 请注意，在此过程结束时，所有提取的峰质谱图都会自动扣除指定的背景质谱图。

1 了解定性分析的基本知识

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS)

任务 11. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 MS/MS) (续)

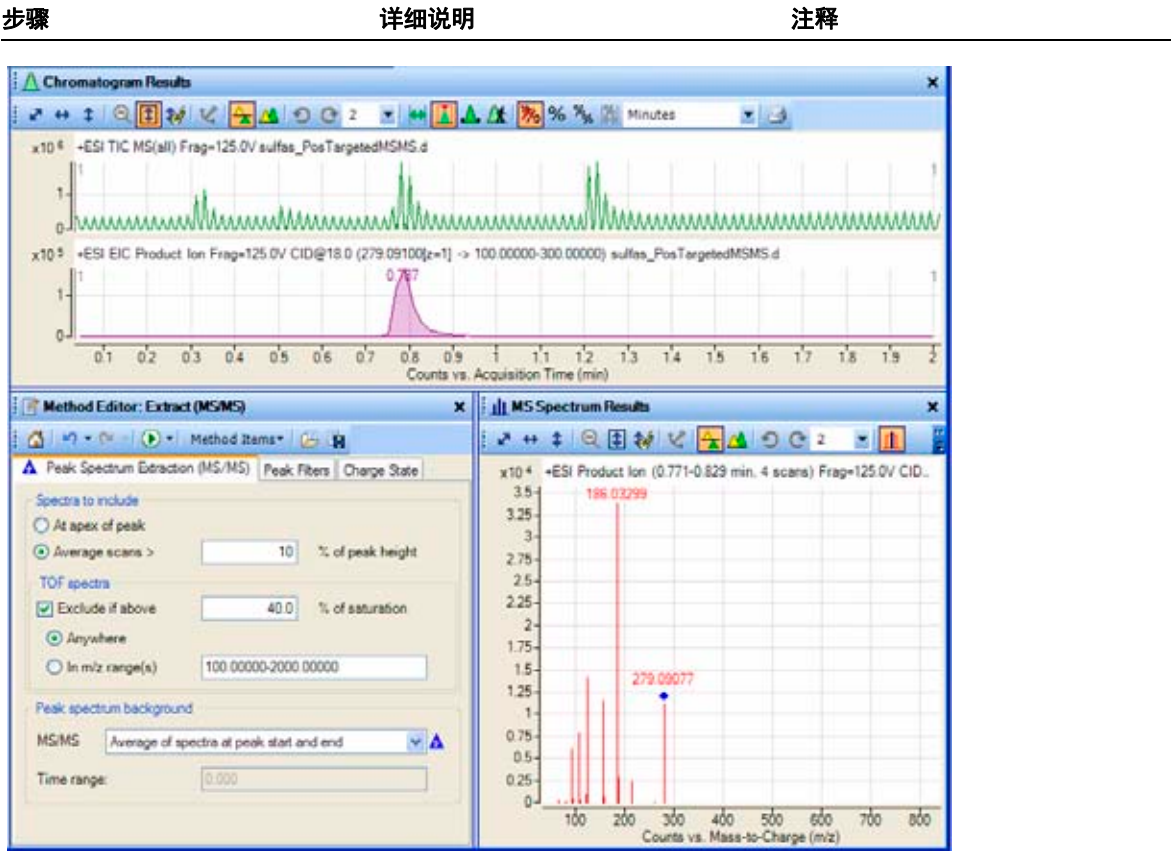


图 29 已扣除背景的产物离子 (MS/MS) 质谱图

- 7 根据步骤 6 中的产物离子质谱图 186.03299 提取 MS/MS EIC。
- 选择提取后积分。
- a 右键单击“产物离子”质谱图。
- b 单击提取色谱图。
- c 在类型列表中, 单击 EIC。
- d 清除提取时积分复选框。
- e 在 MS 级别列表中, 单击 MS/MS。
- f 在 m/z 值框中, 键入 186.03396 和 156.07760。
- g 选中将多个质量合并到一个色谱图中复选框。
- h 单击“确定”。

任务 11. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----

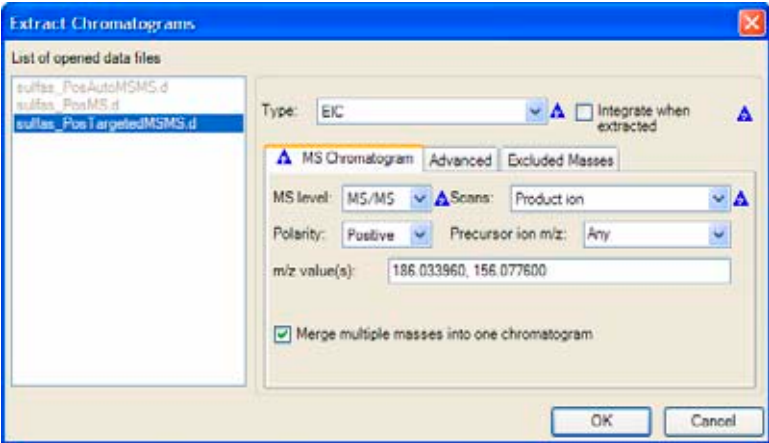


图 30 基于产物离子 EIC 的“提取色谱图”对话框

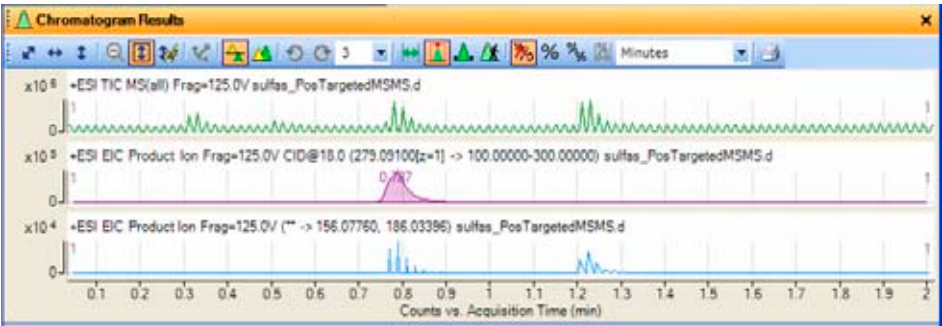


图 31 基于已扣除背景的产物离子质谱图的 EIC

适用于 MS 和 UV 数据的任务

任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV）

在此任务中，您可以从数据文件中提取 MS 和 UV 色谱图。

任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV）

步骤	详细说明	注释
1 从 sulfas_PosMS.d 数据文件中提取 UV 色谱图（DAD1 和 ADC1）。 - 隐藏 sulfas_PosMS.d 以外的所有数据文件 - 删除“TIC MS（全部）”以外的所有色谱图。 - 提取 DAD1 色谱图。 - 提取 ADC1 色谱图。 - 将可见窗格的数目更改为 3。	- a 在“数据浏览器”窗口中，清除与 sulfas-PosMS.d 以外的数据文件对应的复选框。 - b 选中与 sulfas-PosMS.d 数据文件对应的复选框。 - c 删除“TIC MS（全部）”以外的所有色谱图。 - d 使用下列选项或右侧的选项之一，打开“提取色谱图”对话框： - 单击色谱图 > 提取色谱图。 - e 在已打开的数据文件列表中，单击 sulfas-PosMS.d。 - f 在类型列表中，单击其他色谱图。 - g 在检测器组合框中，选择 DAD1。 - h 单击确定。 - i 打开“提取色谱图”对话框。 - j 在已打开的数据文件列表中，单击 sulfas-PosMS.d。 - k 在类型列表中，单击其他色谱图。 - l 在检测器组合框中，选择 ADC1。 - m 单击确定。 - n 确保将“色谱图结果”工具栏中的最大列表窗格数设置为 3。	- 您还可以采用下列方法之一来提取色谱图： - 在色谱图中单击鼠标右键，然后单击提取色谱图。 - 在“数据浏览器”中，高亮显示与 sulfas_PosMS.d 对应的TIC 扫描，然后右键单击TIC 扫描并单击提取色谱图。 - 请注意，您还可以选择在提取后对提取的色谱图自动进行积分。

任务 12. 提取色谱图（MS 和 UV）（续）

步骤	详细说明	注释
----	------	----



图 32 类型为“其他色谱图”的“提取色谱图”对话框

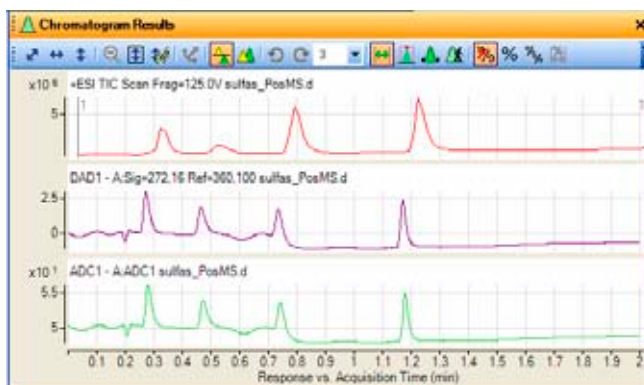


图 33 DAD1 和 ADC1（与原始 TIC 比较）

1 了解定性分析的基本知识

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值 (MS 和 UV)

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值 (MS 和 UV)

在此任务中，您将学习用于对色谱图进行交互式积分、更改积分参数从而修改结果，以及查看每个峰的信噪比的不同方法。

任务 13. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 UV)

步骤	详细说明	注释
1 使用右侧列出的任意选项对 sulfas_PosMS.d UV 色谱图进行积分。 - 高亮显示 DAD1 和 ADC1 色谱图。 - 对这些色谱图进行积分。	a 高亮显示 DAD1 和 ADC1 色谱图。 b 使用下列任一选项，对 sulfas_PosMS.d UV 色谱图进行积分。 - 在主菜单中，单击色谱图 > 对色谱图积分。 - 高亮显示该色谱图。然后，右键单击该色谱图，并单击对色谱图积分。 - 在“数据浏览器”中，高亮显示 sulfas_PosMS.d > 用户色谱图 部分中的 TIC 扫描。然后，右键单击“TIC 扫描”，并单击对色谱图积分。	- 积分使用“常规 MS 积分器”，因为这是在方法 default.m 中选择的积分器，您可以在“色谱图”>“积分 (UV)”>“积分”选项卡中更改此值。 - 请注意，带有默认参数的积分检测的是非常小的峰。

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值 (MS 和 UV)

任务 13. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 UV) (续)

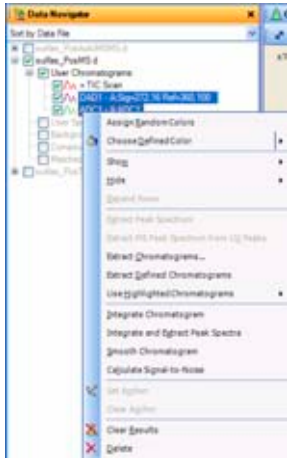
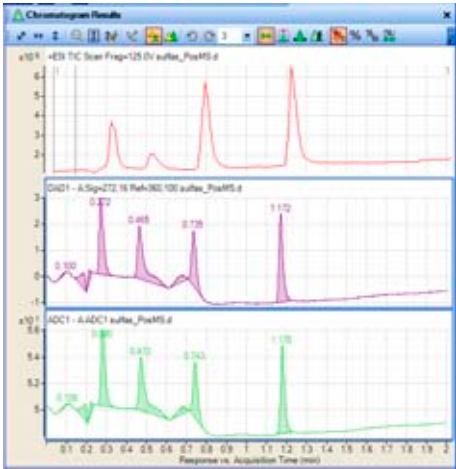
步骤	详细说明	注释
		

图 34 “数据浏览器”中的快捷菜单以及积分的 sulfas_PosMS.d TIC 色谱图

- 2 启用系统适应性计算。

- 显示“色谱图”>“积分(UV)”>“适应性”选项卡。
 - 启用适应性计算。
- a 在方法管理器中，单击**色谱图**>**积分(UV)**以显示“积分器”选项卡。

b 单击**适应性**选项卡。

c 标记**启用系统适应性计算**。

d 选择**美国药典 (USP)**。

e 在“色谱柱死时间”框中，键入 0.15。

f 在“色谱柱长度”框中，键入 500。
- 请注意根据以当前方法保存的值更改设置时出现的蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

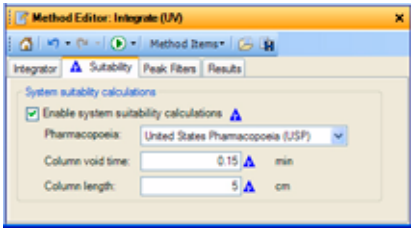


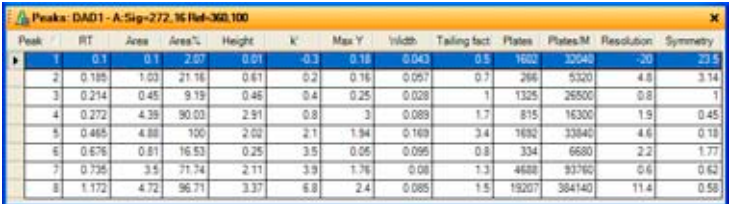
图 35 “色谱图”>“积分 (UV)”>“适应性”选项卡

1 了解定性分析的基本知识

任务 13. 对色谱图 (UV) 进行交互式积分并计算系统适应性值 (MS 和 UV)

任务 13. 对色谱图进行交互式积分 (MS 和 UV) (续)

步骤	详细说明	注释
3 对色谱图重新积分。	单击方法编辑器工具栏中的对色谱图积分图标 ，以便使用新设置进行积分。	
4 查看系统适应性计算。 - 打开“积分峰列表”窗口。 - 查看噪音区域对应的值，并计算积分峰的信噪比。	- a 单击查看 > 积分峰列表。 - b 右键单击“积分峰列表”窗口的标题，并单击浮动。 - c 右键单击任何不想查看的列的列标题，然后单击删除列。 - d 右键单击任何列标题，然后单击“添加 / 删除列”，以更改可见的列。	• “积分峰列表”表中包括系统适应性计算。 • 这些值包括“k'”、“拖尾因子”、“塔板数”、“塔板数 / 米”和“对称因子”。



Peak	RT	Area	Area%	Height	k'	Max Y	Width	Tailing fact	Plates	Plates/M	Resolution	Symmetry
1	0.1	0.1	2.07	0.01	-0.3	0.18	0.043	0.5	1602	32040	-20	23.5
2	0.185	1.03	21.16	0.61	0.2	0.16	0.057	0.7	2675	53500	4.8	3.14
3	0.234	0.48	9.19	0.46	0.4	0.25	0.028	1	1325	26500	0.8	1
4	0.272	4.39	90.03	2.91	0.8	3	0.089	1.7	815	16300	1.9	0.45
5	0.485	4.88	100	2.02	2.1	1.94	0.169	3.4	1692	33840	4.6	0.18
6	0.676	0.81	16.53	0.25	3.5	0.05	0.095	0.8	334	6680	2.2	1.77
7	0.735	3.5	71.74	2.11	3.9	1.76	0.08	1.3	4658	93160	0.6	0.62
8	1.172	4.72	96.71	3.37	6.8	2.4	0.085	1.5	19207	384140	11.4	0.58

图 36 具有“面积”和“信噪比”标签的积分 TIC

5 恢复默认方法的设置，并关闭“方法编辑器”窗口和“积分峰列表”窗口。	- a 要取消所做更改并恢复默认方法中的值，请单击方法编辑器工具栏中的恢复到上次在文件中保存的值图标 。 - b 关闭方法编辑器。 - c 右键单击“积分峰列表”窗口的标题，并单击浮动。 - d 关闭积分峰列表。	• 第二次单击快捷菜单中的“浮动”命令时，“积分峰列表”窗口将固定在其原始位置。
-------------------------------------	---	--

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV)

在此任务中，您可以从色谱图中指定的确切位置提取质谱图。您可以指定“定性分析”程序从特定数据点提取 UV 质谱图、从多个数据点或范围的平均值中提取平均 UV 质谱图，或提取峰质谱图。

任务 14. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 UV）

步骤	详细说明	注释
1 在位于 1.2 分钟处的峰上和 sulfas_PosMS.d 数据文件的最后一个峰的特定数据点上提取质谱图。	a 删除 ADC1 色谱图。 b 单击“色谱图结果”工具栏中的对 X 轴和 Y 轴自动定标图标  以完全缩小。 c 单击“色谱图”工具栏上的范围选择图标 。 d 高亮显示 DAD1 色谱图。 e 要放大到第一个峰，请在 0.17 分钟处的峰上方单击鼠标右键，并将其拖动到 0.31 分钟处的曲线下方，然后松开鼠标。 f 在接近 0.27 分钟的峰上，采用“注释”列中的某种方法提取一个 UV 质谱图。 g 单击“色谱图结果”工具栏中的缩小图标 。 h 要打开“质谱图预览”窗口，请单击质谱图预览图标 。 i 放大到介于 1.1 与 1.3 分钟之间的区域。 j 在接近 1.22 分钟的峰上，提取一个质谱图。该质谱图将显示在“质谱图预览”窗口中。 k 右键单击该质谱图，然后单击复制到用户质谱图。“质谱图预览”窗口将随“UV 质谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。 l 如有必要，请单击“MS 质谱图结果”工具栏中的最大列表窗格数图标，然后选择“2”。	• 您无法从 ADC 色谱图中提取质谱图。 • 进行缩放时，请确保“在缩放期间对 Y 轴自动定标”图标  处于“打开”状态。该图标处于“打开”状态时，背景为橙色。 • 您可以采用下列任一方式来提取质谱图： • 双击该色谱图中的数据点。 • 单击该色谱图中的数据点，然后在该色谱图中的任意位置单击鼠标右键。单击提取 UV 质谱图。此时将显示“提取质谱图”对话框。确保已选择 sulfas_PosMS.d 文件，然后单击提取。 • 请注意，在第一次提取质谱图时，将出现包含该质谱图的“UV 质谱图结果”窗口，并且该质谱图的类型和保留时间将出现在“数据浏览器”中的“用户质谱图”下。 • 启用“质谱图预览”时，系统将显示所有手动选择的质谱图，但不会将其保留在“用户质谱图”部分中。 • 当“质谱图预览”处于打开状态时，“定性分析”程序会在您提取新的质谱图时覆盖以前的质谱图。

1 了解定性分析的基本知识

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV)

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 UV) (续)

步骤

详细说明

注释

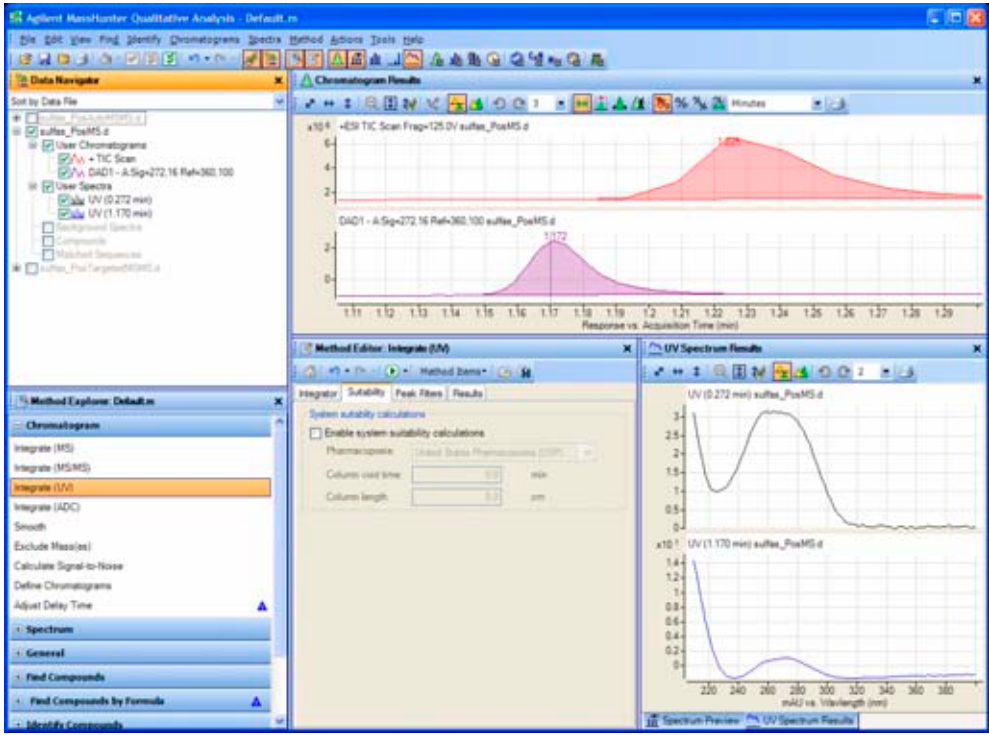


图 37 包含从 sulfas_PosMS.d 文件中的两个积分峰中提取的 UV 质谱图的主窗口

任务 14. 从色谱图中提取质谱图（MS 和 UV）（续）

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

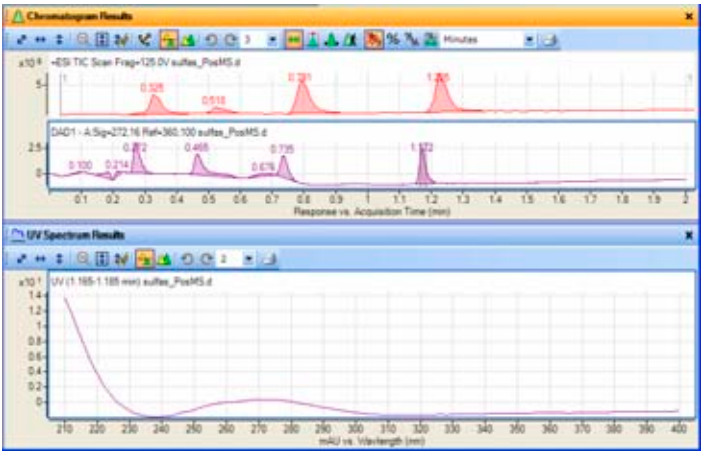


图 38 从最后一个峰的选定范围提取的平均质谱图

1 了解定性分析的基本知识

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (UV)

任务 14. 从色谱图中提取质谱图 (MS 和 UV) (续)

步骤	详细说明	注释
3 提取 sulfas_PosMS.d 中的某个 UV 峰质谱图。 - 删除“数据浏览器”中“用户质谱图”下的所有扫描。 - 对 DAD1 色谱图进行积分。 - 从第三个积分峰中提取峰质谱图。	- a 在“数据浏览器”中的用户质谱图下，高亮显示要删除的用户质谱图（使用 Ctrl）。 - b 右键单击该质谱图，然后单击删除。 - c 单击是。 - d 高亮显示 DAD1 色谱图。 - e 单击色谱图 > 对色谱图积分。 - f 单击“色谱图结果”工具栏中的峰选择图标。 - g 单击 DAD1 色谱图中的第三个积分峰。 - h 右键单击该峰，然后单击提取峰质谱图。	

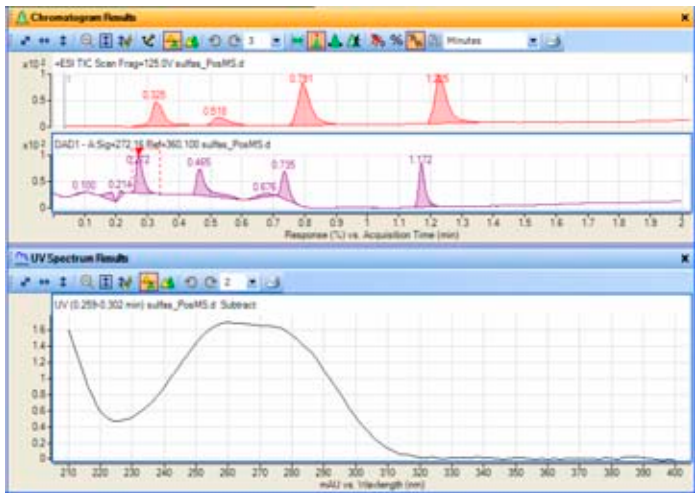


图 39 积分 DAD1 色谱图和 UV 峰质谱图

4 退出该程序，同时不保存结果或方法。	- a 单击文件 > 退出。 - b 当系统询问是否要保存结果和方法时，请单击否两次。
---------------------	--



练习 2

查找和识别化合物

适用于 MS-only 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 [63](#)

任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限于 MS） [63](#)

任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS） [67](#)

任务 3. 打印化合物报告（仅限于 MS） [69](#)

任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅限于 MS） [70](#)

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS） [73](#)

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务 [76](#)

任务 1. 查找化合物（MS 和 MS/MS） [76](#)

任务 2. 识别化合物并生成分子式（MS 和 MS/MS） [79](#)

任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS) [82](#)

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取（MS 和 MS/MS） [84](#)

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

- 在“任务 1”中，您可以使用“查找化合物”算法查找化合物并为每个化合物创建平均质谱图。
- 在“任务 2”中，您可以生成分子式并执行数据库检索以识别化合物。
- 在“任务 3”中，您可以打印基于“任务 1”和“任务 2”的结果的化合物报告。
- 在“任务 4”中，您可以对蛋白质消化运行分子特征提取。



2 查找和识别化合物

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 您可按照这些常规说明亲自体验该程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或倾向于使用逐步学习过程，请使用这些说明。
- 注释 – 如果要了解有关练习中每一步骤的提示及附加信息，请阅读这些注释。

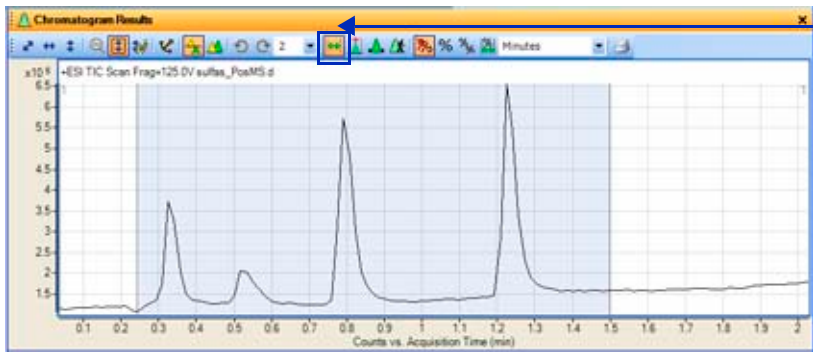
适用于 MS-only 数据（TOF、Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限用于 MS）

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

任务 1. 查找化合物（仅限于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 sulfas_PosMS.d 色谱图。 - 使用“常规”工作流程 - 选择 0.24 到 1.5 分钟之间的范围。	- a 双击 Mass Hunter 定性分析 图标。 - b 单击示例数据文件目录中的 sulfa_PosMS.d 数据文件。清除调用结果数据复选框并单击打开。 - c 单击查看 > 配置工作流程 > 常规。 - d 单击范围选择工具，并选择介于 0.24 和 1.5 分钟之间的区域。	• 系统将自动调用方法 Default.m。要以交互方式调用此方法，请单击方法 > 打开。选择 Default.m 并单击打开。 • 当该窗口处于活动状态时，通过使用 F1 键可以获取任何窗口、对话框或选项卡的帮助。



范围选择工具

图 40 在 TIC 色谱图中选择一个时间范围

2 查找和识别化合物

任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限用于 MS）

任务 1. 查找化合物（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 查找色谱图中的化合物。 - 将 m/z 限制为 100-350。 - 确保您可以查看所有化合物的色谱图和质谱图。	a 在“方法管理器”中，单击查找化合物 > 按分子特征查找化合物。 b 选择小分子（色谱）作为“目标数据类型”。 c 选中限制 m/z为复选框。 d 键入 100 - 350。	- 在联机帮助中了解有关目标数据类型的详细信息。 - 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。请参见第 63 页上的图 40。 - 根据以当前方法保存的值更改设置时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

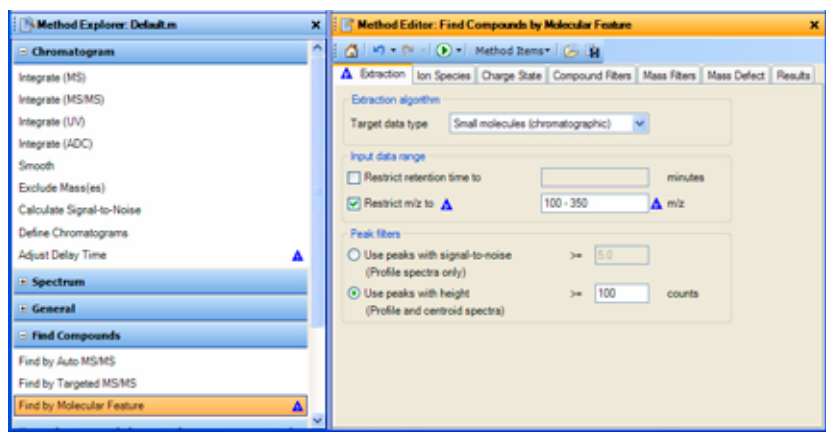
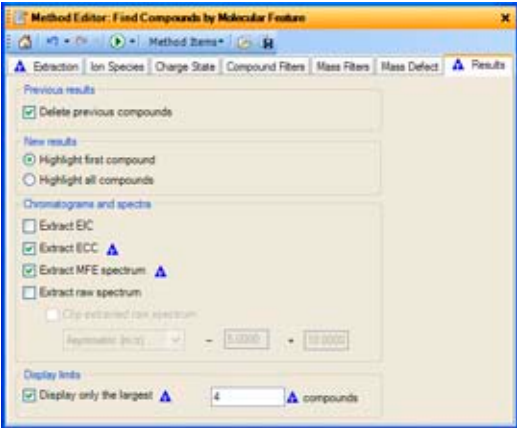


图 41 限制按分子特征查找化合物的质量范围

- e 单击**结果**选项卡。
- f 选中**提取 ECC**和**提取 MFE 质谱图**。
- g 选中**仅显示最大值**并键入 4 作为化合物的数目。
- 如果某个化合物高亮显示，则可通过使用**查找 > 提取完整结果集**命令找到该化合物，然后提取该化合物的完整结果集。

任务 1. 查找化合物（仅限用于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
		
图 42	更改“按分子特征查找化合物”>“结果”选项卡的结果	- h 单击  以便对数据文件运行按分子特征查找化合物算法。 - i 在“色谱图结果”和“MS 质谱图结果”窗口中更改要查看的窗格数目。 • “定性分析”程序应在选定范围内找到 4 种主要化合物。 • 单击方法编辑器工具栏中的  时，系统会自动使用选定范围。在查找 > 按分子特征查找命令中，可以单击整个色谱图或在选定的范围上。

2 查找和识别化合物

任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限用于 MS）

任务 1. 查找化合物（仅限用于 MS）（续）

步骤

详细说明

注释

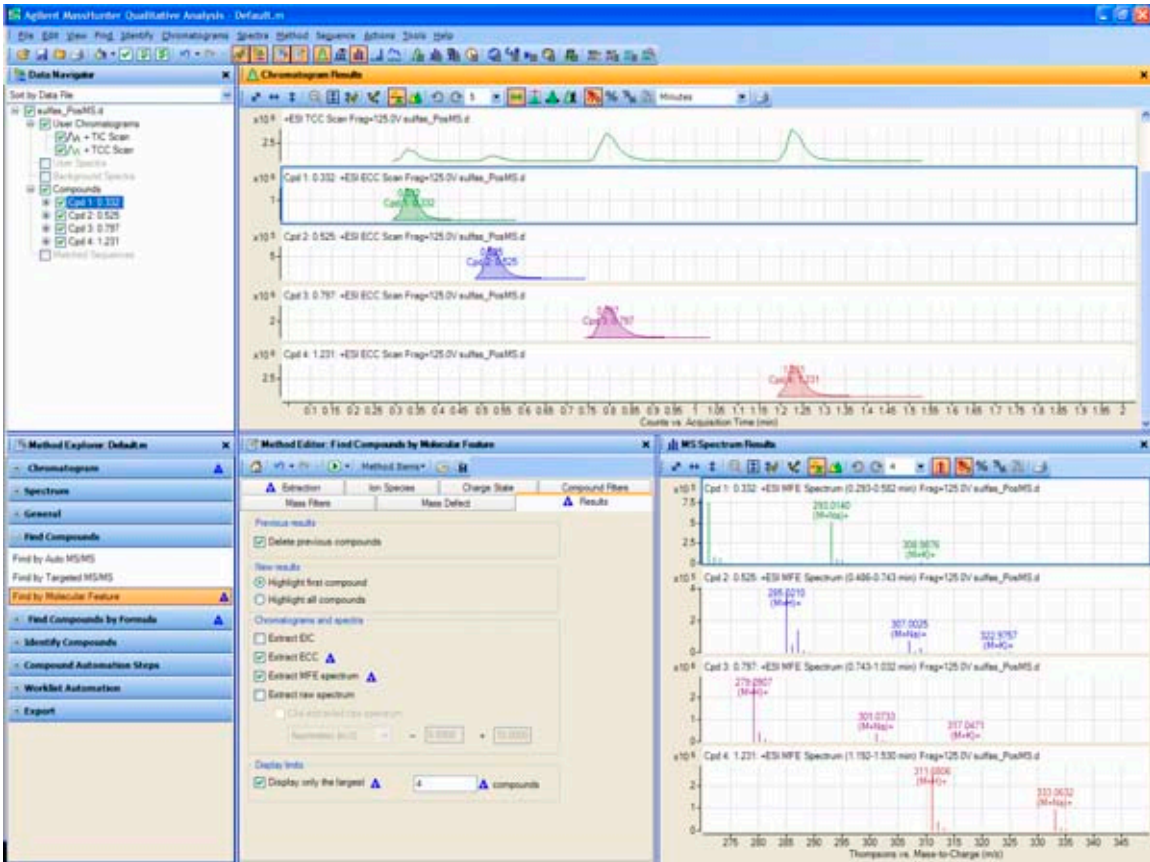


图 43 在磺胺药混合物中查找所有四种化合物

任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS）

在此任务中，您可以生成可能的分子式并检索在“任务 1”中找到的每种化合物。

任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 为化合物 1-4 生成分子式。 - 查看每种化合物的 MS 分子式结果。 - 查看“化合物列表”。 - 关闭“MS 质谱图结果”窗口。 提示：要获取与图 44 相同的结果，请确保您已选择常见有机分子作为同位素模型。	a 在方法管理器中，单击 识别化合物 > 生成分子式 。 b 单击 电荷态 选项卡，并选择 常见有机分子 作为同位素模型。 c 在“数据浏览器”窗口中，单击 化合物 以高亮显示所有化合物。 d 单击 从化合物生成分子式 图标  以运行相应算法。 e 单击“数据浏览器”中的某种化合物，以查看该化合物的 MS 分子式结果 。 f 如有必要，请单击 查看 > 化合物列表 。 g 单击 查看 > MS 质谱图结果 ，以关闭“MS 质谱图结果”窗口。	- 默认情况下，“MS 分子式结果”窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。单击该窗口底部的选项卡，可在窗口之间切换。 - 按适当的 m/z 放大时，您会在质谱图图谱上看到预测的同位素丰度比。有关详细信息，请参见联机帮助。 - 有时，可以使用方法编辑器工具栏中的“运行”图标  从一组可能的操作中选择一项操作。例如，单击此部分中的“运行”图标时，可能会执行两项不同的操作。如果单击箭头，系统会显示可能操作的列表，您可以从中选择要执行的操作。如果从列表中选择其他操作，则会更改默认操作。如果只单击“运行”按钮，则系统将执行默认操作。
2 根据有关化合物 1-4 的分子式，执行数据库检索。 根据分子式执行检索。	a 在“数据浏览器”窗口中，单击 化合物 。 b 在方法管理器中，单击 识别化合物 > 检索数据库 。 c 在“检索标准”下，单击 分子式 。 d 单击主菜单中的 识别 > 检索数据库以查找化合物 。	- 请注意，是否已识别出“化合物列表”中的所有四种磺胺药（请参见图 44）。 - 如果没有显示“DB 检索结果”窗口，请单击查看 > DB 检索结果。

2 查找和识别化合物
任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS）

任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS）（续）

步骤

详细说明

注释

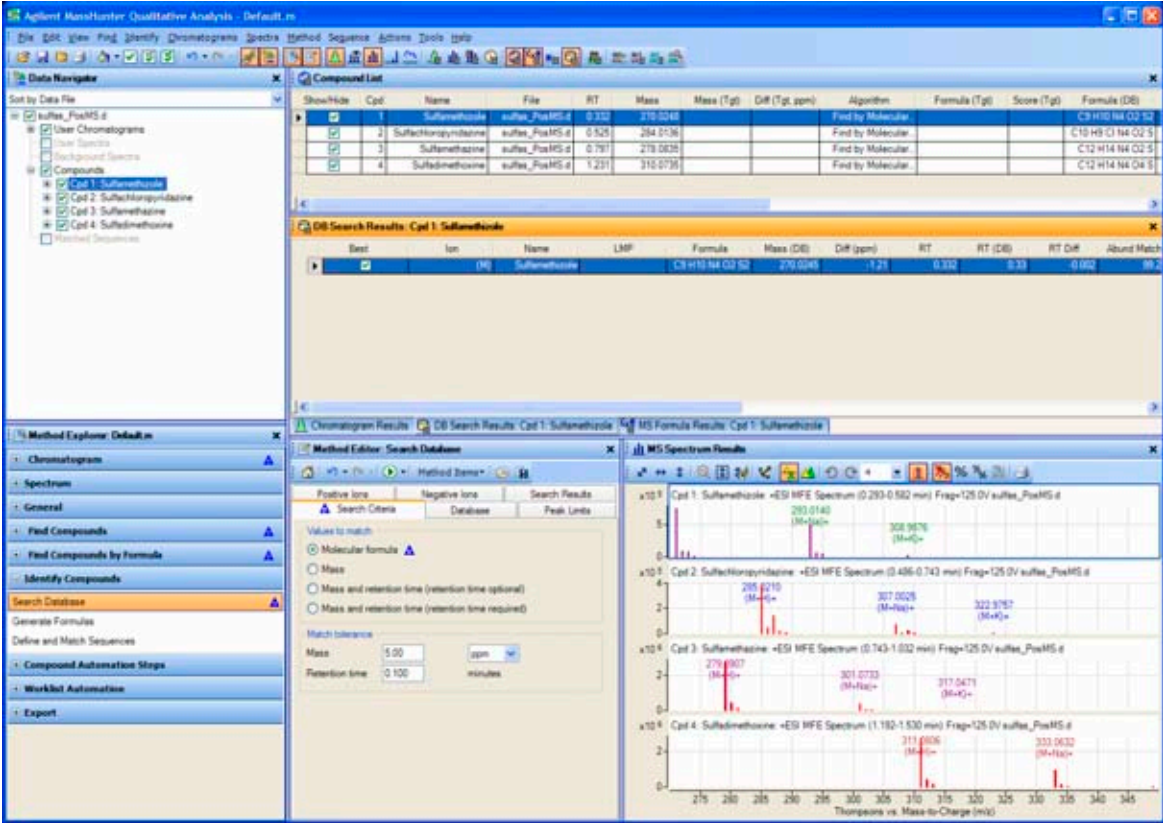


图 44 与 sulfas_PosMS.d 中的化合物 1-4 对应的 MS 分子式和 DB 检索结果

任务 3. 打印化合物报告（仅限于 MS）

在此任务中，您可以为在任务 1. 按分子特征查找化合物（仅限用于 MS）63 中找到且在任务 2. 生成分子式并识别化合物（仅限于 MS）67 中识别的每种化合物生成一份报告。

任务 3. 打印化合物报告（仅限于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 更改化合物报告的方法中的某些选择：	a 在方法管理器中，单击常规 > 化合物报告。 b 清除显示 MS 质谱图（在特异峰上放大）复选框。 c 清除显示 MS/MS 质谱图复选框。 d 清除显示 MS/MS 峰表复选框。 e 单击打印化合物报告图标  以运行相应算法。	• 您可以在这些复选框中指定要在报告中包括的信息（如果可用）。如果该信息不可用，则将自动跳过该部分。例如，当数据文件仅含有 MS 数据时，永远不会包括 MS/MS 结果。

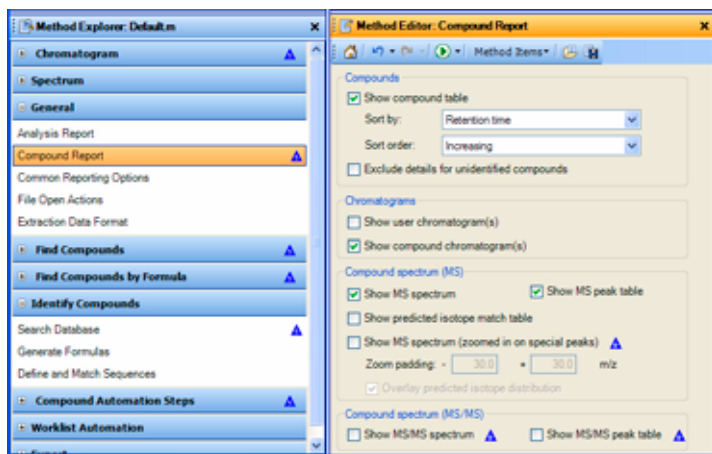


图 45 “方法编辑器”中的“化合物报告”窗口

- | | |
|-------------------|---|
| 2 关闭数据文件，同时不保存结果。 | <p>a 单击文件 > 关闭数据文件。</p> <p>b 系统提示您是否要保存结果时，请单击否。</p> |
|-------------------|---|

2 查找和识别化合物

任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅限于 MS）

任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅限于 MS）

“查找化合物”算法可以在数据中查找化合物，并为每个化合物创建平均 MS 质谱图。此功能是用从复杂数据中“挖掘”信息的一种简便方式。您还可以计算样品纯度。

任务 4. 按分子式查找化合物（仅限用于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 sulfas_PosMS.d 色谱图。 - 使用“常规”工作流程。 - 选择 0.2 到 1.5 分钟之间的范围。	- a 单击文件 > 打开数据文件。 - b 选择 sulfas_PosMS.d 并单击确定。 - c 单击查看 > 配置工作流程 > 常规。 - d 单击“色谱图结果”工具栏中的在缩放期间对 Y 轴自动定标按钮。 - e 单击范围选择工具，并选择介于 0.2 和 1.5 分钟之间的区域。	• 如果切换到“分子式确认”和“样品纯度”工作流程，则“化合物列表”表将自动显示样品纯度列。 • “按分子式查找”部分包括在分子式确认和样品纯度工作流程部分中。
2 在色谱图中指定的范围内查找化合物。 - 启用样品纯度计算。 - 计算 TIC %、ADC %、UV A% 和 UV B% 纯度值。 - 使用最大值作为纯度值。 - 向“化合物列表”窗口中添加列。 - 查看结果。	- a 在方法管理器中，单击按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 选项选项卡。 - b 单击数据库作为分子式的来源进行确认。 - c 在方法管理器中，单击按分子式查找化合物 > 按分子式查找 - 样品纯度选项卡。 - d 选中计算样品纯度复选框。 - e 选中 TIC %、ADC %、UV A% 和 UV B% 复选框。 - f 单击所有选定算法的最大值。 - g 在最低可接受的纯度框中，键入 20。	• 根据以当前方法保存的值更改设置时，会出现蓝色三角形。保存该方法时，该三角形将消失。

任务 4. 按分子式查找化合物（仅限用于 MS）（续）

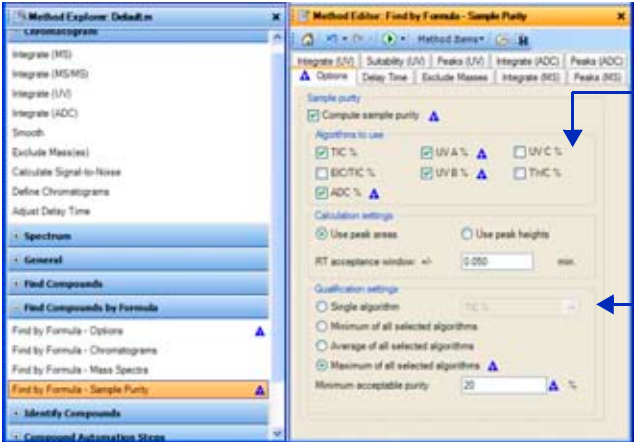
步骤	详细说明	注释
		系统将计算所有选中的算法，即使这些算法不用于确定样品纯度时也是如此。 您可以在此部分中指定如何确定样品纯度。

图 46 为“按分子式查找化合物”算法设置样品纯度选项

- h 单击  以便对数据文件运行按分子式查找化合物算法。
 - i 在“色谱图结果”和“MS 质谱图结果”窗口中更改要查看的窗格数目。
 - j 单击查看 > 化合物列表以打开“化合物列表”窗口。
 - k 右键单击“算法”列，然后单击添加 / 删除列以打开“化合物列”对话框。
 - l 单击“类别”列标题，以便对可能的列进行排序。
 - m 标记纯度值列、“纯度结果”列、“ADC 面积百分比”列、“TIC 面积百分比”列、“UVA 百分比面积”列，以及“UVB 百分比面积”列。
 - n 单击确定。
- “定性分析”程序可在选定范围内找到 6 种主要化合物。
 - 为了向您显示样品纯度结果，已将其其他列从“化合物列表”表中删除。
 - “化合物列表”固定在“定性分析”窗口的顶部，这样可以看到更多的列。有关移动窗口的详细信息，请参见第 19 页上的“任务 4. 更改窗口布局”。

2 查找和识别化合物

任务 4. 按分子式查找化合物并计算样品纯度（仅限于 MS）

任务 4. 按分子式查找化合物（仅限用于 MS）（续）

步骤

详细说明

注释

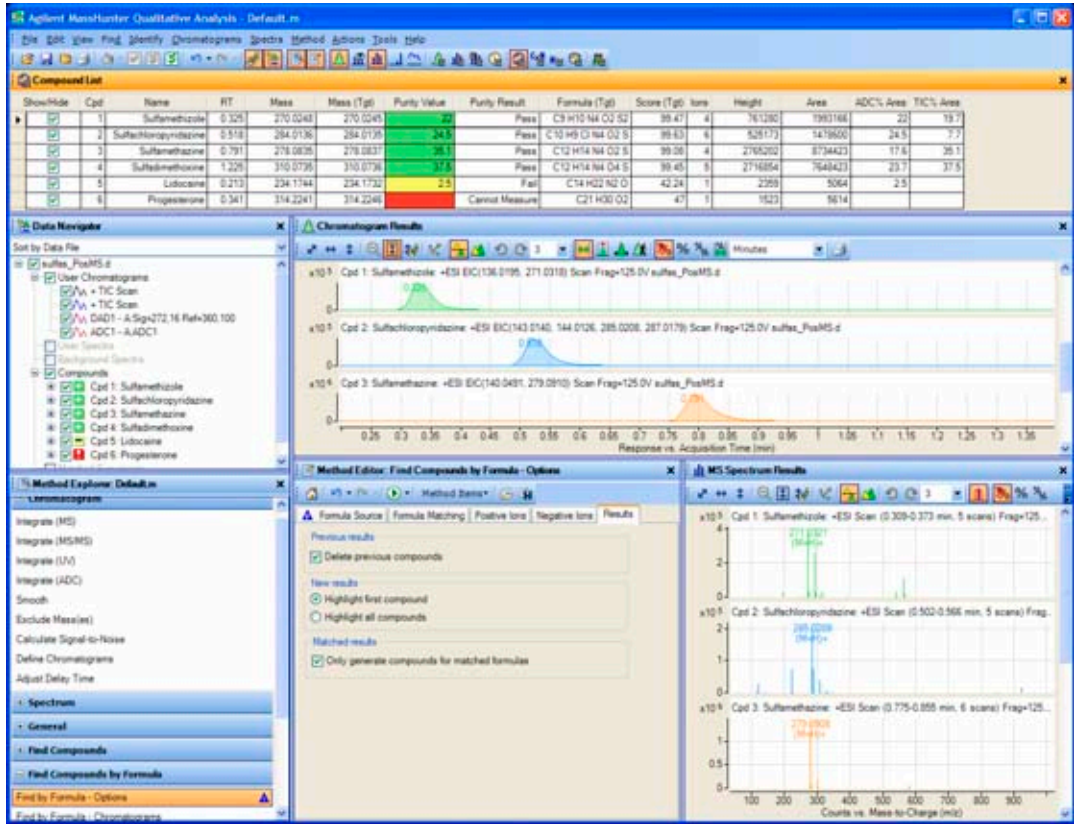


图 47 在磺胺药混合物中查找所有四种化合物

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

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

- 3 关闭数据文件，同时不保存结果。

- a 单击文件 > 关闭数据文件。
b 系统提示您是否要保存结果时，请单击否。

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）

在此任务中，您可以仅使用 MS 数据对蛋白质消化执行分子特征提取。

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）

步骤	详细说明	注释
1 使用下列参数对数据文件 peptide-ms-only.d 执行分子特征提取：	- 打开 peptide-ms-only.d 数据文件。 - 单击方法管理器中的查找化合物 > 按分子特征查找，以便在“方法编辑器”窗口中显示相应的参数。 - 在提取选项卡中，选中限制保留时间为复选框。 - 键入 2.5 - 4。 - 清除限制 m/z为复选框（如有必要）。 - 在电荷态选项卡上，选择“同位素模型”框中的缩氨酸。 - 在化合物过滤器选项卡上，选中上限复选框并为化合物的数目键入 20。 - 在结果选项卡上，选中提取 ECC 和提取 MFE 质谱图复选框。 - 单击  以便对数据文件运行按分子特征查找化合物算法。 - 如有必要，请单击“色谱图结果”工具栏的最大列表窗格数中的 2。	上限过滤器不会限制提取的特征数，而只是限制在“定性分析”中显示的化合物数目。 - 生成的 .mhd 文件存储在数据文件目录下的“结果”目录中。 - 您可以使用“定性分析分子特征”算法来提取特征。然后，您可以使用 Agilent MassHunter Profiling 软件或 GeneSpring MS 软件对通过不同的提取操作获得的数据集进行比较。 - 如果单击“将所有过滤器应用于 MHD 文件”，则系统只会将通过过滤器的化合物写入 MHD 文件中。否则，系统会在应用过滤器之前将化合物写入 MHD 文件中。上限过滤器不适用于 MHD 文件。
2 查找 m/z 570.7362 离子的化合物质谱图，并确定电荷态、质量和离子种类。	- 在“MS 质谱图结果”窗口中，滚动查找包含 m/z 570.7362 离子的质谱图。 - 查找电荷态。 - 查找离子种类。 - 在“化合物列表”中查找此化合物。 - 查找质量。	- 化合物 4 具有包含此离子且电荷态为 +2 的质谱图。 - 质量为 1139.4577。离子种类为 $(M+2H)+2$。您可以在“MS 质谱图结果”窗口以及“质谱图峰列表”窗口中标有离子的列中看到离子种类。

2 查找和识别化合物
任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）（续）

步骤 详细说明 注释

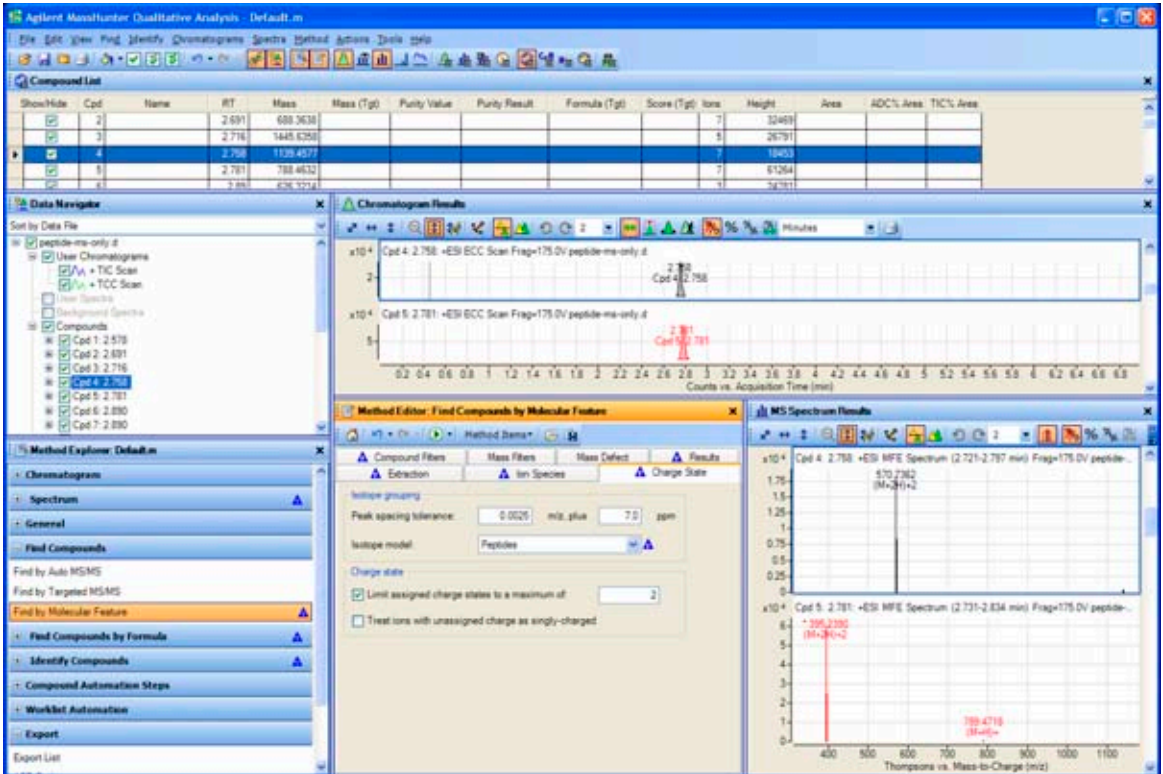
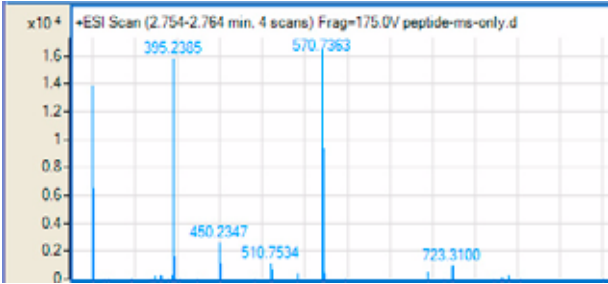


图 48 通过定性分析按分子特征查找化合物

- 3 提取此缩氨酸的积分 EIC。
- 将 570.7362 用作 m/z 值。
 - a 右键单击数据文件的 TIC，然后单击提取色谱图。
 - b 在类型列表中，单击 EIC。
 - c 选中提取时积分复选框。
 - d 键入 570.7362 作为 m/z 值，然后单击确定。

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）

任务 5. 对蛋白质消化执行分子特征提取（仅限于 MS）（续）

步骤	详细说明	注释
4	为 EIC 中的第一个积分峰提取平均质谱图。 放大为与第一个积分峰对应的内容。 选择一个从中途点到最高峰的范围。	a 右键单击 EIC，并拖动光标以放大第一个积分峰周围的区域。 b 确保已选择范围选择图标，并选择一个跨越中点处的峰的范围。
		c 在峰的着色区域内双击，以提取平均质谱图。
		
5	关闭数据文件。	a 单击文件 > 关闭数据文件。 b 要求保存结果时，单击否。

2 查找和识别化合物

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

适用于 MS/MS 数据（Q-TOF 或三重四极杆质谱仪）的任务

任务 1. 查找化合物（MS 和 MS/MS）

FindCompounds 算法可以在 MS/MS 数据中识别化合物，并为每个化合物创建平均 MS 和 MS/MS 质谱图。此功能是从复杂数据中“挖掘”信息的一种简便方式。

任务 1. 查找化合物（MS 和 MS/MS）

步骤	详细说明	注释
1 打开 sulfas-PosAutoMSMS.d 数据文件的 TIC，并选择介于 0.2 和 1.3 分钟之间的范围。 - 使用“常规”工作流程。 - 高亮显示介于 0.2 和 1.3 分钟之间的范围。	a 如果没有打开程序，请双击 Mass Hunter 定性分析 图标。否则，单击 文件 > 打开数据文件。 b 单击示例数据文件目录中的 sulfa-PosAutoMSMS.d 数据文件，然后单击 打开。 c 单击 查看 > 配置工作流程 > 常规 命令。 d 单击“色谱图结果”工具栏中的 范围选择 图标（如有必要），并选择介于 0.2 和 1.3 分钟之间的范围。	- 系统将自动打开方法 default.m。要打开其他方法，请单击 方法 > 打开，选择该方法，并单击 打开。 - 方法管理器的“调整延迟时间”选项卡中会自动显示一个蓝色三角形。此数据文件还包含 DAD 和 ADC 数据。如果您不想输入延迟时间，则可以忽略这些蓝色三角形。

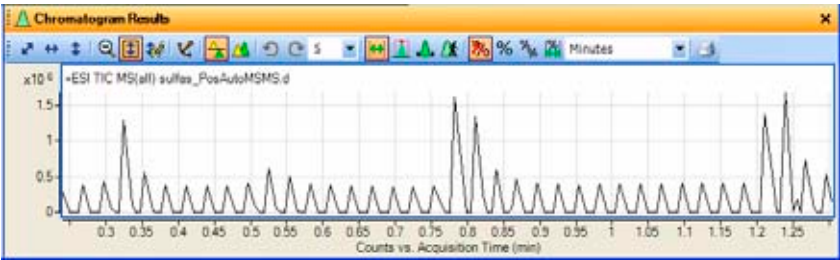


图 49 为 sulfas-PosAutoMSMS.d 数据文件的 TIC 色谱图选择的范围

任务 1. 查找化合物（MS 和 MS/MS）（续）

步骤	详细说明	注释
2 查找色谱图中介于 0.2 到 1.3 分钟范围内的化合物。 - 输入正 MS/MS TIC 阈值 100000。 - 排除质量 121.0504 和 922.0097。	a 在方法管理器中，单击查找化合物 > 按自动 MS/MS 查找。 b 在“正在处理”下的正 MS/MS TIC 阈值中，键入 100000。 c 单击排除的质量选项卡。 d 单击从所有新色谱图中排除质量（或 m/z 范围）。 e 键入 121.0504、922.0097 f 选择对称 (ppm)。 g 选择 20。	- 您可以选择要在其中查找化合物的色谱图区域。请参见图 49。 - 如果某个化合物高亮显示，则可通过使用化合物 > 提取完整结果集菜单项找到该化合物，然后提取该化合物的完整结果集。

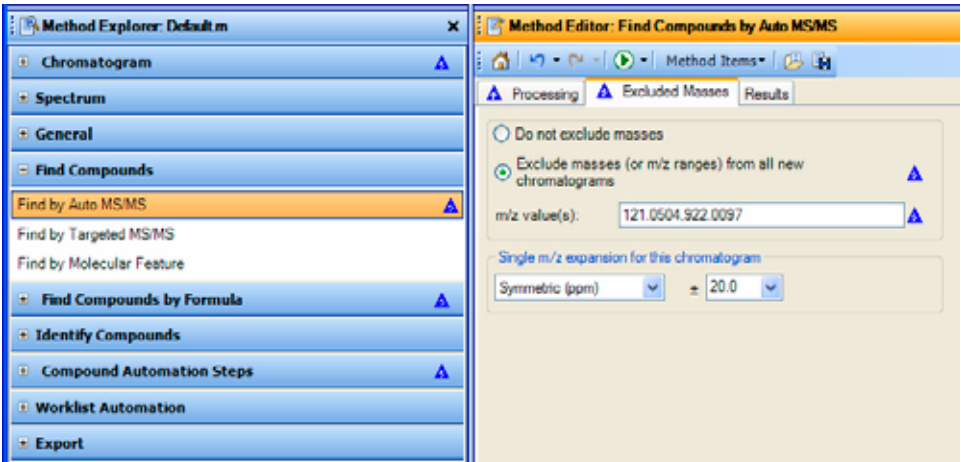


图 50 “按自动 MS/MS 查找化合物”的“排除的质量”选项卡

- | | | |
|---|--|--|
| <ul style="list-style-type: none">选择排除 EIC、MS 质谱图和 MS/MS 质谱图。 | <p>h 单击结果选项卡。</p> <p>i 选中提取 EIC、MS 和 MS/MS 复选框。</p> <p>j 单击  以便对数据文件运行按自动 MS/MS 查找化合物算法。</p> | <ul style="list-style-type: none">在下列条件下，“定性分析”程序会在选定范围内找到 4 种化合物。在下一个任务中，您可以识别哪些化合物为磺胺药。 |
|---|--|--|

2 查找和识别化合物

任务 1. 查找化合物 (MS 和 MS/MS)

任务 1. 查找化合物 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
3 仅显示化合物 4 的两个质谱图。 请参见图 51。	a 仅高亮显示化合物 4。 b 单击主工具栏中的仅显示高亮显示的项目。 c 展开“化合物 4”，以查看色谱图和两个质谱图。	- 显示两个质谱图是一种用于显示单一化合物的所有信息的便捷方式。 - 请注意，系统会为每种化合物提取前级离子和产物质谱图。红色菱形表示前级离子。

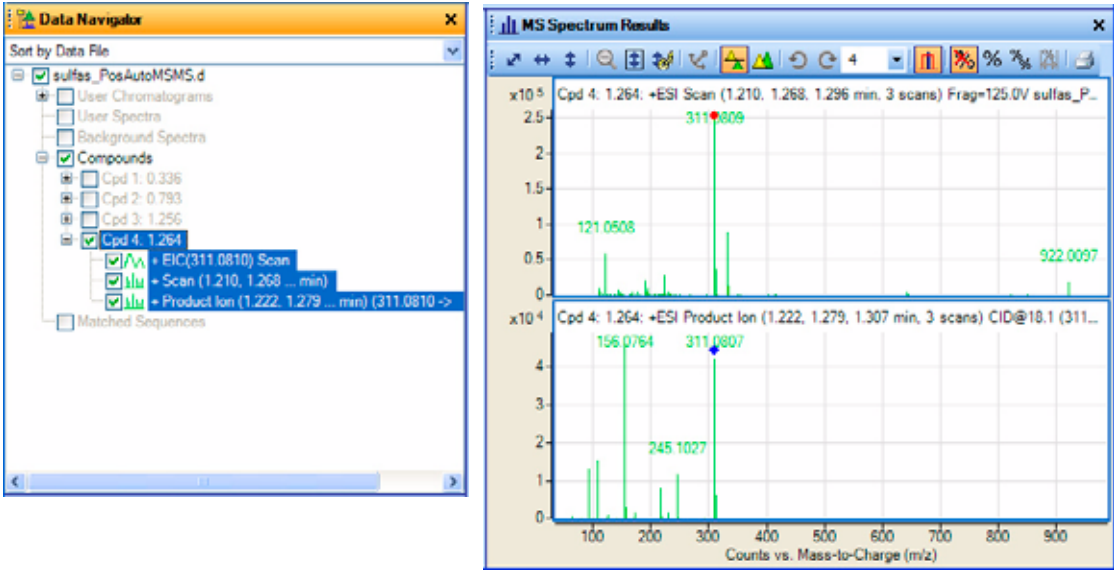


图 51 显示化合物 4 的 MS 和 MS/MS 质谱图的“数据浏览器”窗口和“MS 质谱图结果”窗口

任务 2. 识别化合物并生成分子式 (MS 和 MS/MS)

在此任务中，您可以识别在“任务 1”中找到的化合物并为之生成分子式。

任务 2. 识别化合物并生成分子式 (MS 和 MS/MS)

步骤	详细说明	注释
1 检索数据库，根据质量找到化合物 1-4。	a 在“数据浏览器”窗口中高亮显示所有化合物。 b 在方法管理器中，单击识别化合物 > 检索数据库。 c 在“检索标准”选项卡中，单击质量。 d 单击主菜单中的识别 > 检索数据库以查找化合物。相反，您可以单击检索数据库以查找化合物图标以运行该算法。 e 单击查看 > 化合物列表。 f 通过单击查看 > MS 质谱图结果，关闭“MS 质谱图结果”窗口。 g 选中与“化合物列表”中的每个化合物对应的显示 / 隐藏复选框。化合物 1-4 已在最后一个峰中隐藏。或者，使用主工具栏中的显示所有高亮显示的项目图标。 h 通过单击“色谱图结果”选项卡，显示“色谱图结果”窗口。此窗口将随“MS 分子式结果”窗口以及“DB 检索结果”窗口一起显示在选项卡中。	• 请注意，“化合物列表”中已识别出三种磺胺药（请参见第 81 页上的图 53）。 • 请注意，未在数据库检索中找到与化合物 3 对应的化合物名称。

2 查找和识别化合物
任务 2. 识别化合物并生成分子式（MS 和 MS/MS）

任务 2. 识别化合物并生成分子式（MS 和 MS/MS）（续）

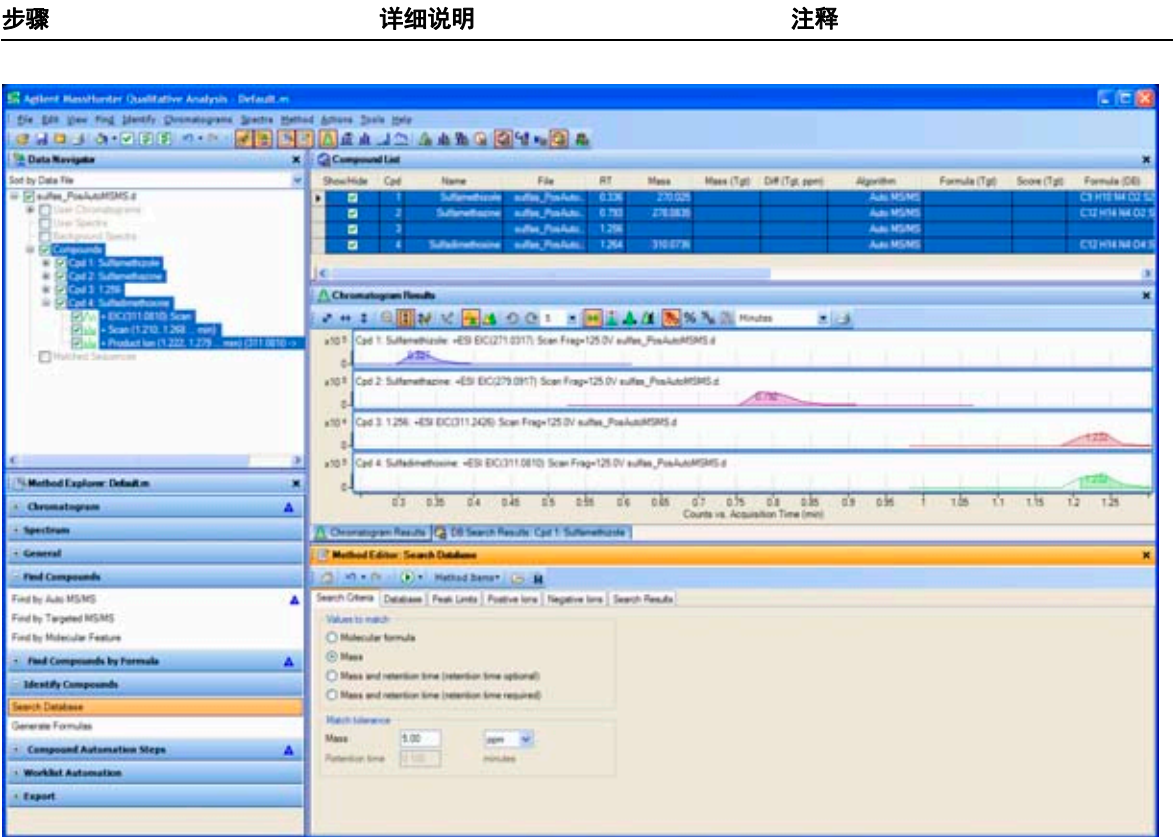
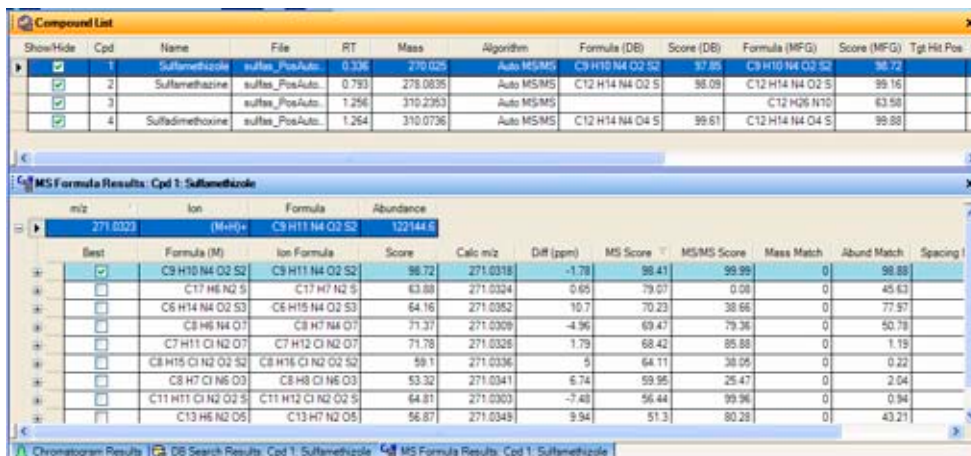


图 52 sulfas-PosAutoMSMS.d 数据文件中的化合物及其识别

任务 2. 识别化合物并生成分子式 (MS 和 MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
2 为化合物 1-4 生成分子式。		
- 查看每种化合物的 MS 分子式结果。 - 查看“化合物列表”。 - 关闭“MS 质谱图结果”窗口。	a 在方法管理器中，单击识别化合物 > 生成分子式。 b 单击电荷态选项卡，并选择常见有机分子。 c 单击从化合物生成分子式图标  以运行相应算法。 d 单击“MS 分子式结果”窗口中的加号图标，以展开该表。 e 单击查看 > MS/MS 分子式详细信息。 f 将此窗口移动到“MS 分子式结果”窗口的下方。 g 在“数据浏览器”中，高亮显示要查看其MS 分子式结果和MS/MS 分子式详细信息的化合物。 h 使用“化合物列表”窗口中的滚动条查看 MFG 结果。	默认情况下，“MS 分子式结果”窗口随“色谱图结果”窗口一同显示在选项卡中。单击该窗口底部的选项卡，可在窗口之间切换。 按适当的 m/z 放大时，您会在质谱图图谱上看到预测的同位素丰度比。有关详细信息，请参见联机帮助。 请注意，已针对所有化合物找到了一个或多个分子式。 使用“删除列”快捷命令，可以从“化合物”表中删除空列。 请注意，检索数据库后得到的分子式与“生成分子式”算法确定的分子式相同。 单击“工具”>“化合物标签配置”，可以更改化合物标签。

提示：要获取与图 53 相同的结果，请确保您已为同位素模型选择了**常见有机分子**。



Best	Formula (M)	Ion Formula	Score	Calc m/z	Diff (ppm)	MS Score	MS/MS Score	Mass Match	Abund Match	Spacing
☒	C9 H10 N4 O2 S2	C9 H11 N4 O2 S2	98.72	271.0318	-1.78	98.41	99.99	0	98.88	
☐	C17 H6 N2 S	C17 H7 N2 S	63.88	271.0324	5.65	79.07	0.08	0	45.63	
☐	C6 H14 N4 O2 S3	C6 H15 N4 O2 S3	64.16	271.0352	16.7	70.23	38.66	0	77.97	
☐	C8 H6 N4 O7	C8 H7 N4 O7	71.37	271.0309	-4.96	69.47	79.36	0	50.78	
☐	C7 H11 Cl N2 O7	C7 H12 Cl N2 O7	71.78	271.0329	1.79	68.42	85.88	0	1.19	
☐	C8 H15 Cl N2 O2 S2	C8 H16 Cl N2 O2 S2	59.1	271.0336	5	64.11	38.05	0	0.22	
☐	C8 H7 Cl N6 O3	C8 H8 Cl N6 O3	53.32	271.0341	6.74	59.95	25.47	0	2.04	
☐	C11 H11 Cl N2 O2 S	C11 H12 Cl N2 O2 S	64.81	271.0303	-7.48	56.44	99.96	0	0.94	
☐	C13 H6 N2 O6	C13 H7 N2 O6	56.87	271.0348	9.94	51.3	80.28	0	43.21	

图 53 sulfas_PosAutoMSMS.d 中的化合物 1 对应的 MS 分子式结果和 MS/MS 分子式详细信息

2 查找和识别化合物

任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS)

任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS)

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

任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS)

步骤	详细说明	注释
1 更改化合物报告的方法中的某些选择： - 关闭查看在特异峰上放大的 MS 质谱图的功能（如有必要）。 - 打开报告中的 MS/MS 选项。	a 在方法管理器中，单击常规 > 化合物报告。 b 清除显示 MS 质谱图（在特异峰上放大）复选框（如有必要）。 c 选中显示 MS/MS 质谱图复选框和显示 MS/MS 峰表复选框。	报告中仅包括在此选项卡中选中的部分。

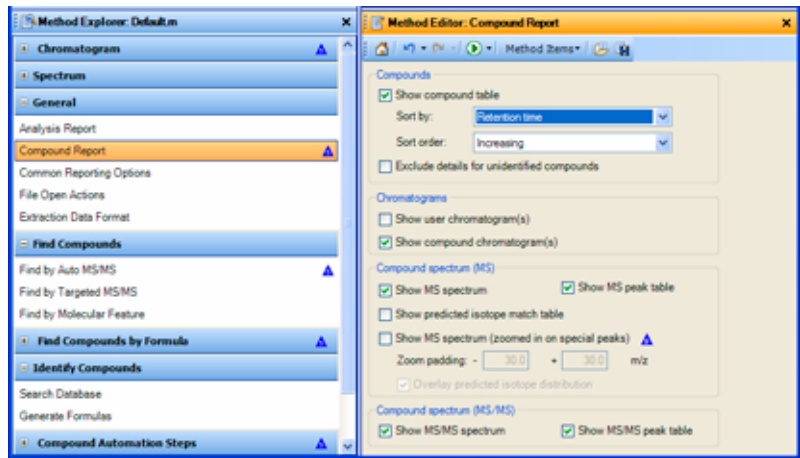
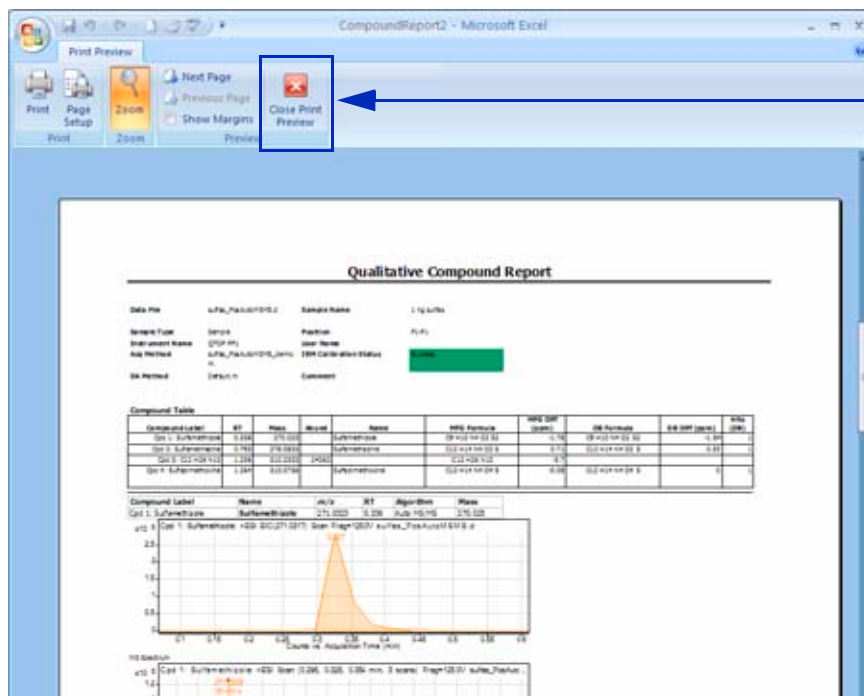


图 54 “方法编辑器”中的“化合物报告”窗口

- 2 打印该报告。
- 预览该报告。
- a 单击**打印化合物报告**图标  以打印该报告。
- b 在“打印化合物报告”对话框中，单击**所有结果**。
- c 选中**打印报告**。
- d 选中**打印预览**。
- e 单击**确定**。
- 此外，也可以通过选中**将报告另存为 PDF 文件**复选框的方式来创建 PDF 文件。只有在安装 Excel 后安装了 Microsoft Excel PDF 加载项的情况下，此选项才起作用。

任务 3. 打印化合物报告 (MS/MS) (续)

步骤	详细说明	注释
----	------	----



此按钮将关闭“打印预览”窗口，同时不会向打印机发送报告。

图 55 “方法编辑器”中的“化合物报告”窗口

- 3 关闭“打印预览”窗口。
 - a 单击工具栏中的**关闭打印预览**。
 - 如果要打印报告，请单击“打印”按钮。该报告将通过在“打印化合物报告”对话框中选定的打印机进行打印。
- 4 关闭数据文件，同时不保存结果。
 - a 单击**文件 > 关闭数据文件**。
 - b 系统提示您是否要保存结果时，请单击**否**。

2 查找和识别化合物

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取 (MS 和 MS/MS)

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取 (MS 和 MS/MS)

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

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取 (MS 和 MS/MS)

步骤	详细说明	注释
1 使用下列参数在数据文件 peptide-auto.d 中执行分子特征提取： • 确保布局返回到“默认布局”。 • 时间范围为 2.5 到 4 分钟。 • 将同位素模型设置为缩氨酸。 • 过滤，以便仅显示丰度最大的 20 种化合物。 • 更改窗口布局，以便与图 56 的布局（下一页）匹配。	- a 打开 peptide-auto.d 数据文件。 - b 单击查看 > 配置工作流程 > 常规命令。 - c 单击确定以继续。 - d 单击否以保存方法更改。 - e 单击方法管理器中的查找化合物 > 按分子特征查找，以便在“方法编辑器”窗口中显示相应的参数。 - f 在提取选项卡中，选择小分子（色谱）作为“目标数据类型”。 - g 选中限制保留时间为复选框。 - h 键入 2.5 - 4。 - i 在电荷态选项卡上，选择缩氨酸作为同位素模型。 - j 在化合物过滤器选项卡上，选中上限复选框并为化合物的数目键入 20。 - k 在“结果”选项卡上，选中提取 ECC 和提取 MFE 质谱图复选框。 - l 单击  以便对数据文件运行按分子特征查找化合物算法。 - m 如有必要，请单击“色谱图结果”工具栏的“最大列表窗格数”中的 3。	• 要使布局返回默认布局，请单击查看 > 窗口布局 > 恢复默认布局。 • 上限过滤器不会限制提取的特征数，而只是限制在“定性分析”中显示的化合物数目。 • 您可以使用“定性分析分子特征”算法来提取特征。然后，您可以使用 Agilent MassHunter Profiling 软件或 GeneSpring MS 软件对通过不同的提取操作获得的数据集进行比较。 • 生成的 .mhd 文件存储在数据文件目录下的“结果”目录中。
2 查找 m/z 625.31585 离子的化合物质谱图，并确定电荷态。	- a 在“MS 质谱图结果”窗口中，滚动查找包含 m/z 625.3166 离子的质谱图。 - b 查找电荷态。	• 化合物 7 具有包含此离子且电荷态为 +1 的质谱图。

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取（MS 和 MS/MS）

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取（MS 和 MS/MS）（续）

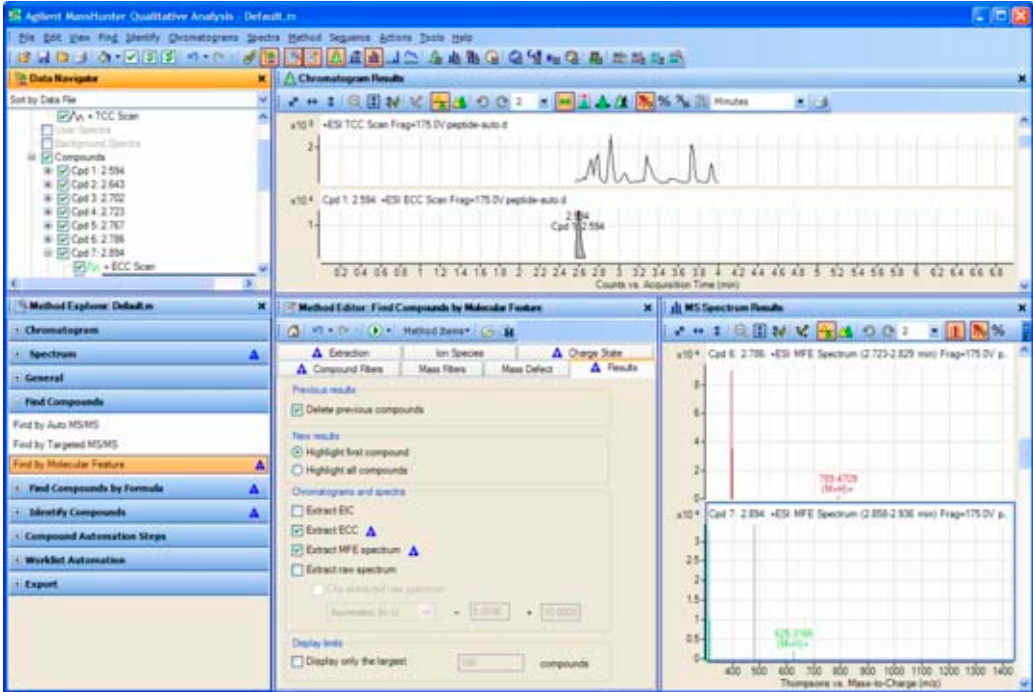
步骤	详细说明	注释
		

图 56 使用自动 MS/MS 数据按分子特征查找蛋白质消化中的化合物

- 3 退出该程序，同时不保存结果或方法。

a 单击文件 > 退出。

b 当系统询问是否要保存结果和方法时，请单击否两次。

2 查找和识别化合物

任务 4. 对蛋白质消化执行分子特征提取 (MS 和 MS/MS)

练习 3

使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法 89

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法 94

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作 99

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法 104

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

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

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

对于这些示例，可以使用不同的工作流程。您可以先浏览这些不同的工作流，然后再确定最适合您的任务的那一种。有关详细信息，请参见第 112 页上的“[工作流程](#)”。



3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

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 – 您可按照这些常规说明亲自体验该程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或倾向于使用逐步学习过程，请使用这些说明。
- 注释 – 如果要了解有关练习中每一步骤的提示及附加信息，请阅读这些注释。

任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

首次开始使用定性分析程序时，将调用 default.m 方法。您可以对已打开的方法执行更改，并进行保存，或打开新的方法，执行更改，然后保存方法。不能覆盖 default.m 方法。

您也可以设置为使用打开数据文件时的方法运行特定操作。

打开数据文件时，也可以调用那些用于创建与数据文件一起进行存储的结果的方法。每当您将结果与数据文件一起保存时，此方法都将自动进行保存。

任务 1. 设置和运行定性分析方法

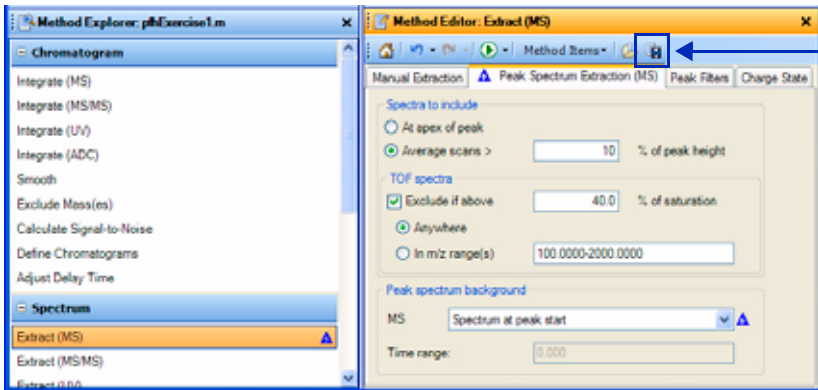
步骤	详细说明	注释
1 设置方法以提取 TIC 色谱图。 - 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件。 - 确保打开数据文件时程序不会运行任何文件操作。 - 确保方法为 Default.m。 - 确保窗口布局为默认布局。 - 针对 MS 数据定义一个 TIC 色谱图。 - 关闭周期循环加和，因为这是一个 MS-only 数据文件。	a 在桌面上双击定性分析图标。 b 在“打开数据文件”对话框中，选择 sulfas_PosMS.d。 c 如有必要，清除从所选的方法中运行“打开文件”操作复选框。 d 如有必要，清除调用结果数据复选框。 e 单击打开。 f 单击查看 > 配置工作流程 > 常规命令。 g 单击确定继续调用工作流程。 h 单击否保存方法更改。 i 在方法管理器中，选择色谱图 > 定义色谱图。 j 删除 BPC 选择。 k 选择 TIC 作为类型。 l 确保 MS 级别为 MS。 m 清除循环加和复选框。 n 单击添加。	- 将自动调用常规工作流程的默认布局。如果要恢复为此默认布局，请单击查看 > 窗口布局 > 恢复默认布局。此命令将始终恢复与常规工作流程一起使用的布局。 - 要调用方法，请执行下列操作： - 单击方法 > 打开。 - 选择方法 - 单击打开。 - 您可以在上一个练习中发现，在每次对方法执行更改之后，都将在更改的旁边以及已更改部分旁边的方法管理器中显示一个蓝色的三角形。 - 您也可以通过在“工具 > 配置工作流程”菜单中单击命令的方式来更改工作流程。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 设置和运行定性分析方法（续）

步骤	详细说明	注释
2 编辑方法以积分数据。 将积分限制为四个最高峰。	- a 在方法管理器中，单击色谱图 > 积分 (MS)。 - b 单击峰过滤器选项卡。 - c 在“最大峰数”部分，选中限制为最大值（按峰高）复选框。 - d 键入 4。	更新“色谱图 > 积分 (MS)”部分“峰过滤器”选项卡中的值时，会同时更新方法查看器其他部分中的值。将出现蓝色三角形以显示这些“其他部分”。
3 对积分进行测试，以确保仅显示 4 个积分峰。	单击对色谱图积分图标 ，针对数据文件执行操作。	
4 将方法保存为 <i>iiiexercise1</i> ，其中“ <i>iii</i> ”表示您姓名的首字母。	- a 从顶层菜单中，单击方法 > 另存为。 - b 键入 <i>iiiexercise1</i>。 - c 单击保存。	请注意，保存方法时，会导致在打开的方法中所有表示值发生更改的蓝色三角形消失。
5 更改峰质谱图背景，以在峰的开始处使用谱图。	- a 在方法管理器中，单击色谱图 > 提取 (MS)。 - b 单击峰质谱图提取 (MS)。 - c 对于峰质谱图背景，选择峰开始处的质谱图。	保存之后的任何更改都会导致产生更多的蓝色三角形。



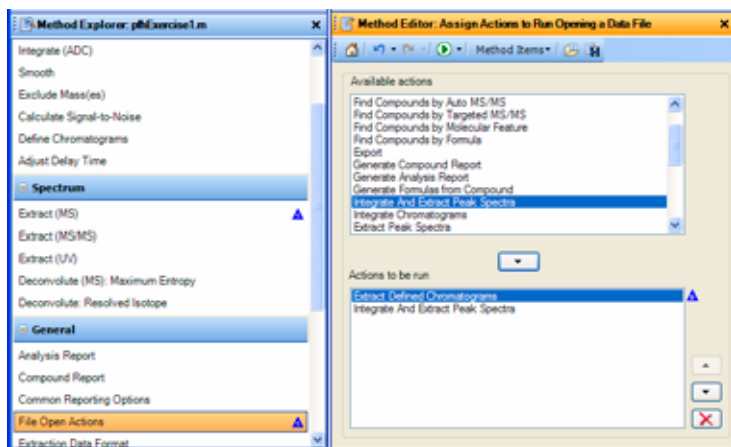
您可以单击“保存方法”图标以保存当前方法。

图 57 “谱图 > 提取 (MS) > 峰质谱图提取”选项卡

- 6 对 MS 谱图提取进行测试，以确保扣除背景谱图。
- 单击**提取 MS 谱图**图标 ，针对数据文件执行操作。

任务 1. 设置和运行定性分析方法（续）

步骤	详细说明	注释
7 保存方法。	- 按照以下三种方式中的一种来保存方法：  单击方法编辑器中的保存方法图标。 - 右键单击方法编辑器，然后单击保存方法。 - 从顶层菜单中，单击方法 > 保存。	“保存方法”图标如第 90 页上的图 57 所示
8 设置方法以自动化刚刚更改其参数的操作。	列出在打开此数据文件或其他数据文件时将要执行的操作。	
提示：请查看方法管理器中的“常规”部分。	a 在方法管理器中，选择常规 > 文件打开操作。 b 从可用操作列表中，选择积分和提取峰质谱图。 c 单击添加按钮 ，将所选操作移动到要运行的操作列表上。您也可以在所选操作上双击，从而将其移动到其他列表。	
9 测试文件打开操作。	单击立即运行文件打开操作图标 ，以运行数据文件上的操作。	不会覆盖色谱图和质谱图。将添加新的色谱图和质谱图。



两种不同的操作是要运行的操作列表中的一部分。第一个操作是提取所定义的色谱图。然后，对该色谱图进行积分并提取峰。

图 58 方法编辑器中的“常规 > 文件打开操作”部分

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 使用常规工作流程设置和运行定性分析方法

任务 1. 设置和运行定性分析方法（续）

步骤	详细说明	注释
10 保存方法，并关闭数据文件，同时不保存结果。	a 单击方法编辑器中的保存方法图标。 b 单击文件 > 关闭数据文件，并在要求您保存结果时单击否。	
11 再次打开数据文件，并运行所指定的操作。	a 单击文件 > 打开数据文件，并选择 sulfas_PosMS.d。 b 选中从所选的方法中运行 “打开文件” 操作复选框。	如果已错误地保存了以前的结果，请清除调用结果数据复选框。

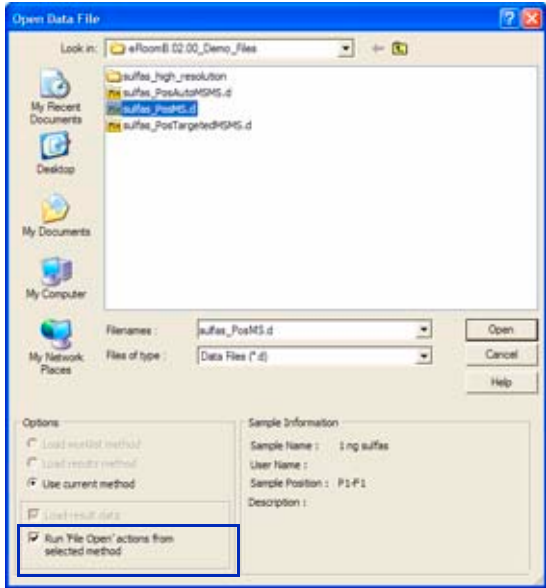


图 59 “打开数据文件”对话框，已选中其中的“从所选的方法中运行‘打开文件’操作”

c 单击 打开 。	屏幕应与图 60 中所显示的内容类似。（您可能必须移动窗口边界。）
------------------	---

任务 1. 设置和运行定性分析方法（续）

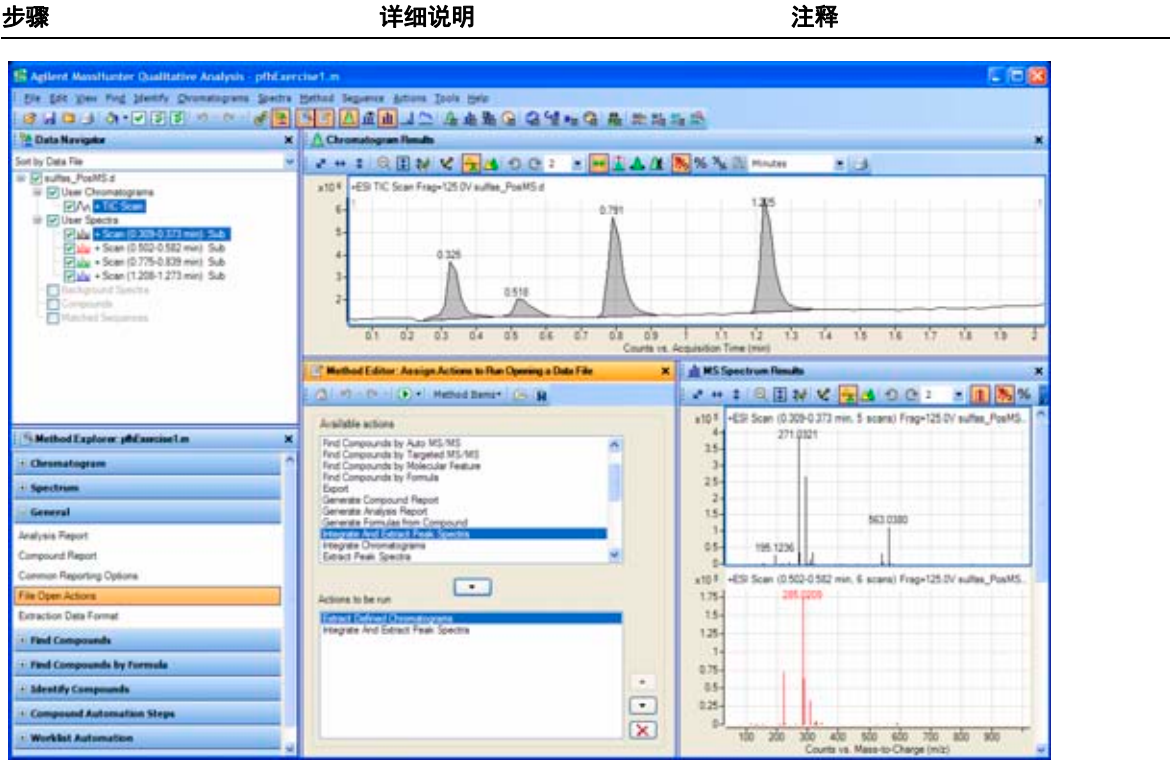


图 60 积分 TIC 和已扣除背景的质谱图 – 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件时生成

- 12 再次关闭数据文件，而不保存结果。
- a 单击文件 > 关闭数据文件。
 - b 要求保存结果时，单击否。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

在此任务中，您将设置一个定性分析方法，其中包含要按特定顺序运行的分析操作的列表。包括提取和积分色谱图、提取质谱图、搜索数据库峰质谱图、为质谱图生成分子式并打印分析报告。

设置此方法时，您将切换到色谱图峰识别工作流程。

您也可以设置为使用打开数据文件时的方法来运行此自动化分析。

任务 2. 设置并运行可进行自动化分析的方法

步骤	详细说明	注释
1 再次打开 sulfas_PosMS.d 。 - 确保打开文件时该方法不会针对数据文件执行任何操作。 - 确保该方法为 iiiexercise1.m。	- a 单击查看 > 配置工作流程 > 色谱图峰识别工作流程命令。 - b 单击确定切换工作流程。 - c 单击否保存方法更改。 - d 单击文件 > 打开数据文件。 - e 在“打开数据文件”对话框中，选择 sulfas_PosMS.d。 - f 清除从所选的方法中运行“打开文件”操作复选框。 - g 单击打开。 - h 单击方法 > 打开，选择 iiiexercise1.m 方法，然后单击打开。	• 确保调用结果数据复选框已清除或显示为灰色。 • 切换到其他工作流程时，将调用新的方法、新的窗口布局，并且方法管理器中将添加一个新的部分。 • 如果系统提示您保存针对方法的更改，请单击否。
2 查看色谱图峰识别算法部分。	• 在方法管理器中，单击色谱图峰识别工作流程。	• 请注意此工作流程中的九个部分。这些部分中的大多数都是方法中其他部分的副本。 • 在方法管理器中关闭其他所打开的项目。
3 确保新的结果将覆盖以前的结果。	- a 在方法管理器中选择以前的结果。 - b 选中删除所有以前的结果。	

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

任务 2. 设置并运行可进行自动化分析的方法（续）

步骤	详细说明	注释
4 确保可以提取 TIC，并且将对四个最大的峰进行积分。	a 选择 色谱图提取 。 b 单击 色谱图 选项卡。 c 确保已将 TIC 选作用于查找质谱图的色谱图。 d 在其他色谱图上标记 信号 A 进行提取。 e 选择 色谱图积分 。 f 单击 峰 (MS) 选项卡，然后选中 限制为最大值（按峰高） 并键入 4。	• 请注意，此部分是独一无二的。您不能在方法管理器的任何其他位置输入此信息。
5 设置提取 MS 质谱图，并在峰的前后扣除质谱图平均值的峰质谱图背景。	a 选择 质谱图提取 。 b 单击 峰质谱图 选项卡。 c 对于 峰质谱图背景 ，选择在 峰开始和结束处的质谱图的平均值 。	• 请注意，方法管理器的其他部分将显示蓝色三角形。这表示相同的参数值同样也在其他位置发生了更改。
6 选择搜索数据库，并针对所有质谱峰生成分子式。 • 不要更改“分子式生成”或“数据库搜索”参数值。	a 选择 质谱峰识别 。 b 选中 检索数据库以查找每个峰 复选框。 c 选中 为每个峰生成分子式 复选框。 d 单击 所有峰 。	• 请注意，此部分是独一无二的。您不能在方法管理器的任何其他位置输入此信息。
7 此时，请对自动化分析流程进行测试。	• 在“质谱峰识别”部分单击运行色谱图峰识别图标 。	• 单击“分子式生成”部分的  图标时，首先单击箭头，然后从可能的操作列表中选择运行色谱图峰识别。默认情况下，在本部分中运行的操作为从质谱峰生成分子式。其他若干部分中也包含不同的默认操作。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

任务 2. 设置并运行可进行自动化分析的方法（续）

步骤	详细说明	注释
8 可打开这些窗口查看下列各项：	a 单击查看 > DB 搜索结果。 b 单击查看 > MS 分子式结果。 c 移动这些窗口，以便它们可以随“色谱结果”窗口一同显示在选项卡中，如图 61 所示。 d 查看每个 MS 扫描的每个列表，确保色谱图峰识别算法中的所有操作均已执行。	- 有关如何在主屏幕上移动窗口的信息，请参阅练习 1 任务 4。 - 您也可以使用主工具栏中的图标来显示这些窗口。

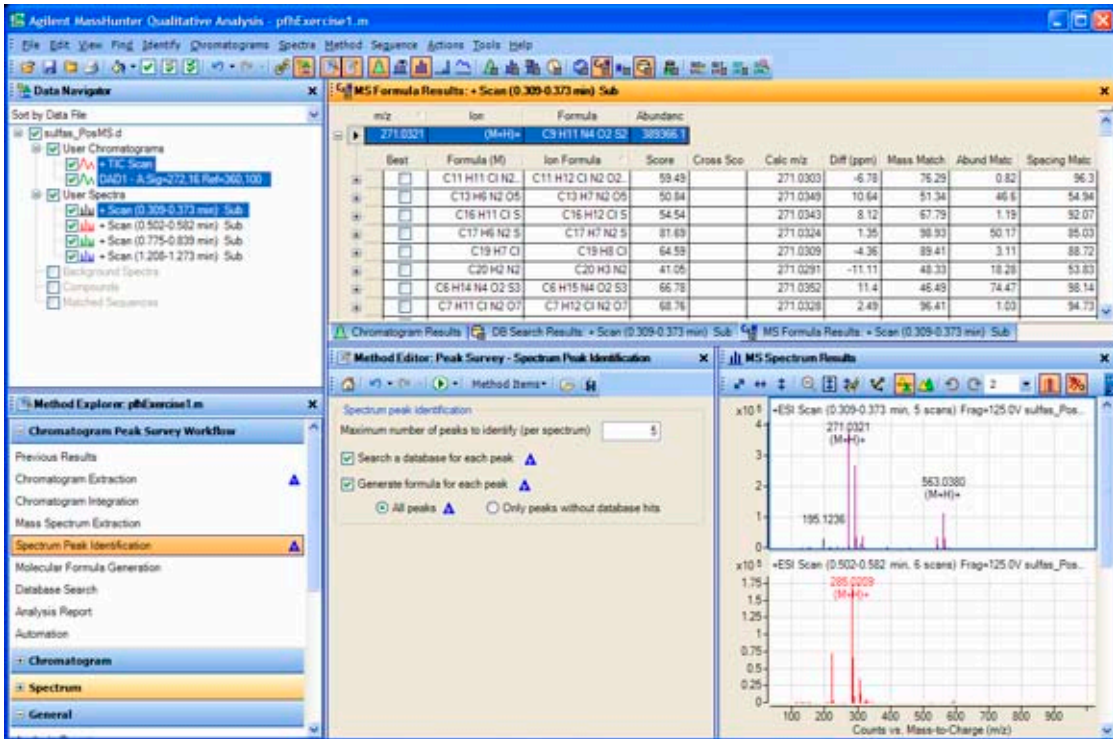


图 61 运行自动化分析步骤后显示在选项卡中的结果

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

任务 2. 设置并运行可进行自动化分析的方法（续）

步骤	详细说明	注释
9 将方法保存为 <i>iiiexercise2</i> ，其中“ <i>iii</i> ”表示您姓名的首字母。	a 从顶层菜单中，单击 方法 > 另存为 。 b 键入 <i>iiiexercise2</i> 。 c 单击 保存 。	• 请注意，保存方法时，会导致在打开的方法中所有表示值发生更改的蓝色三角形消失。
10 设置分析报告并指出要为此练习打印的部分。 • 保存方法。	a 选择 分析报告 。 b 根据需要进行更改。 c 单击 打印分析报告 图标。 d 如有必要，单击方法编辑器中的 保存方法 图标。	• 选择是否在选择要运行的操作时打印报告。
11 设置方法，以在打开数据文件时运行自动化分析。 • 保存方法。	a 选择 色谱图峰识别工作流程 > 自动化 > 文件打开操作 。 b 在 要运行的操作 列表中，选择每一个项目，并单击 删除 图标  。 c 在 可用操作 列表中选择 不生成分析报告的色谱图峰识别 ，并单击 添加 按钮  。 d 单击方法编辑器中的 保存方法 图标。	• 如果需要，您也可以对这些操作进行测试。
12 关闭方法编辑器、方法管理器和数据浏览器。 • 移动窗口，使得它们的外观类似于图 62 中的布局。 • 关闭数据文件，同时不保存结果。	a 单击方法编辑器、方法管理器和数据浏览器的 关闭 按钮。 b 移动窗口，使得它们的外观类似于图 62。 c 单击 文件 > 关闭数据文件 。 d 要求保存结果时，单击 否 。	• 请注意，您在打开新的数据文件时所显示的窗口布局与上次所使用的窗口布局相同。
13 再次打开 <i>sulfas_PosMS.d</i> 数据文件，以运行自动化分析。 • 结果应与图 62 中所显示的结果类似。	a 单击 文件 > 打开数据文件 。 b 选择 <i>sulfas_PosMS.d</i> c 选中 从所选的方法中运行“打开文件” 操作复选框。 d 单击 打开 。	

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 2. 设置并运行可通过色谱图峰识别工作流程进行自动化分析的方法

任务 2. 设置并运行可进行自动化分析的方法（续）



图 62 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件时色谱图峰识别操作的结果

- 14 关闭数据文件，同时不保存结果。
- a 单击文件 > 关闭数据文件。
 - b 要求保存结果时，单击否。

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作

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

若要设置此方法，您需要切换到 MS 目标化合物筛选工作流程。也可以使用“化合物自动处理步骤”部分来设置此方法。

您也可以设置为使用打开数据文件时的方法来运行此化合物自动处理。

任务 3. 设置并运行可自动化化合物识别的方法

步骤	详细说明	注释
1 再次打开 sulfas_PosMS.d 。 - 确保打开文件时该方法不会针对数据文件执行任何操作。 - 确保该方法为 iiiexercise2.m。 - 启动 MS 目标化合物筛选工作流程。	a 单击 查看 > 配置工作流程 > MS 目标化合物筛选 。 b 单击 确定 切换工作流程。 c 单击 否 保存方法更改。 d 单击 文件 > 打开数据文件 。 e 在“打开数据文件”对话框中，选择 sulfas_PosMS.d 。 f 清除从所选的方法中运行“打开文件”操作复选框。 g 单击 打开 。 h 单击 方法 > 打开 。选择 iiiexercise2.m 方法。 i 单击 打开 。 j 单击“否”保存方法更改。	- 确保调用结果数据复选框已清除或显示为灰色。 - 切换到 MS 目标化合物筛选工作流程时，将调用 Screening-Default.m 方法。
2 查看可查找和识别化合物的自动化步骤。 将“方法编辑器”窗口作为选项卡放置在合适的位置。	a 在方法管理器中，单击 MS 目标化合物筛选 > 自动化 。 b （可选）将“方法管理器”窗口作为选项卡放置在“数据浏览器”窗口上。 c 关闭化合物列表窗口。	在此工作流程中，“方法编辑器”是一个浮动窗口。您可以将其保留为浮动窗口，也可以将其设置为另一窗口的选项卡，例如“数据浏览器”窗口。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作

任务 3. 设置并运行可自动化化合物识别的方法（续）

步骤	详细说明	注释
3 选择搜索数据库，并针对所有化合物生成分子式。 确保当前是根据分子特征查找化合物。	- a 单击分析选项选项卡。 - b 单击按分子特征查找。 - c 选中检索数据库以查找每个化合物复选框。 - d 选中为每个化合物生成分子式复选框。 - e 单击所有化合物。 - f 选中仅显示已识别的化合物复选框。	化合物可以通过搜索数据库算法、生成分子式算法进行识别，或者通过按分子式查找算法进行查找。如果已安装 MassHunter BioConfirm 软件，则也可以通过匹配序列算法来识别化合物。
4 确保新的结果将覆盖以前的结果。	- a 单击结果选项卡。 - b 选中删除所有以前的结果复选框。	
5 此时，请对自动化流程进行测试。	在“MS 目标化合物筛选工作流程 > 自动化”部分，单击运行化合物自动处理步骤图标 .	
6 可打开这些窗口查看下列各项： - 化合物列表 - DB 搜索列表 - MS 分子式结果列表 - 确保结果列表与色谱结果一同显示在选项卡中，如图 63 所示。 - 查看每个化合物的每个列表（化合物 1 和 4 除外）。	- a 单击查看 > 化合物列表。 - b （如有必要）单击查看 > DB 搜索结果。 - c （如有必要）单击查看 > MS 分子式结果。 - d 清除数据浏览器中的“化合物 1”和“化合物 4”复选框。或者，您可以清除“化合物列表”窗口显示 / 隐藏列中“化合物 1”和“化合物 4”的复选框。 - e 查看每个已标识化合物的每个列表，以确保化合物自动处理步骤中的所有操作均已执行。	- 有关如何在主屏幕上移动窗口的信息，请参阅练习 1 任务 4。 “MS 分子式结果”窗口和“DB 搜索结果”窗口均将作为选项卡与“色谱结果”窗口一同显示，如图 63 所示。
7 将方法保存为 <i>iiiexercise3</i> ，其中“ <i>iii</i> ”表示您姓名的首字母。	- a 从顶层菜单中，单击方法 > 另存为。 - b 键入 <i>iiiexercise3</i>。 - c 单击保存。	请注意，保存方法时，会导致在打开的方法中所有表示值发生更改的蓝色三角形消失。

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作

任务 3. 设置并运行可自动化化合物识别的方法（续）

步骤

详细说明

注释

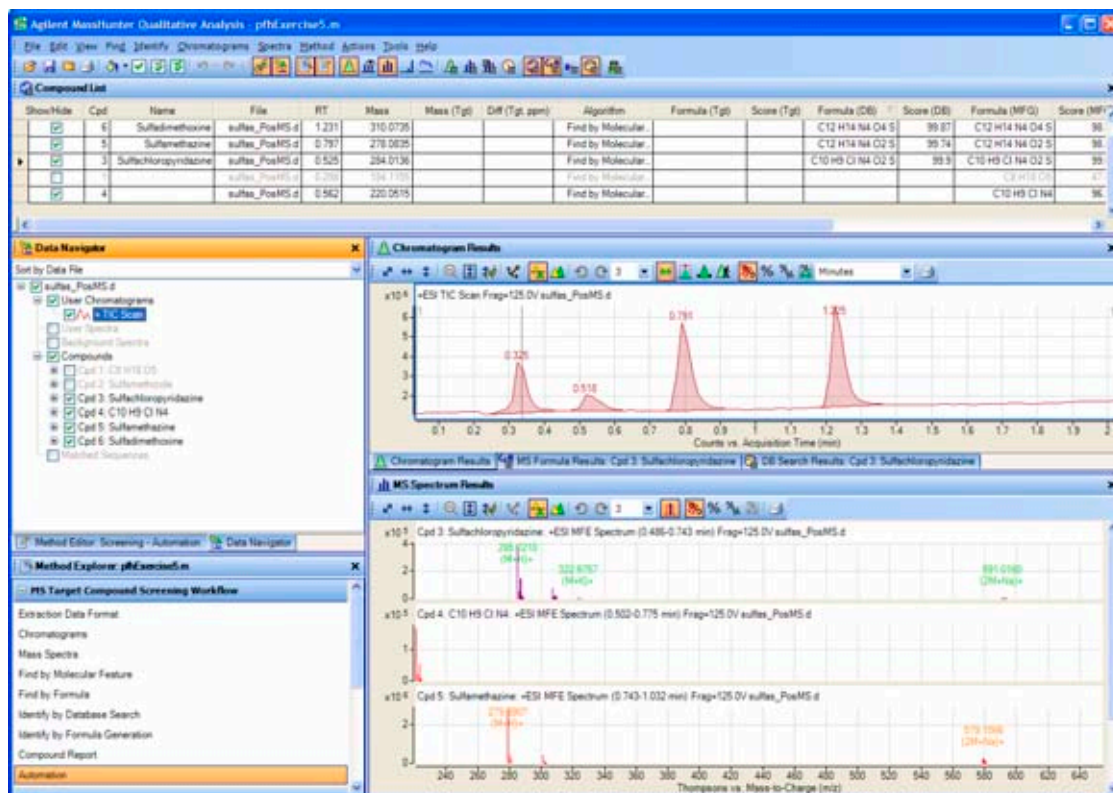


图 63 运行化合物自动识别步骤后显示在选项卡中的结果

- 8 为此练习设置化合物报告。
 - a 选择化合物报告。
 - b 根据需要进行更改。
 - c 如有必要，单击方法编辑器中的保存方法图标。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作

任务 3. 设置并运行可自动化化合物识别的方法（续）

步骤	详细说明	注释
9 设置方法，以在打开数据文件时运行自动化化合物识别。 保存方法。	- a 选择 MS 目标化合物筛选工作流程 > 自动化 > 文件打开操作。 - b 在要运行的操作列表中，选择任意操作，并单击删除图标 。 - c 在可用操作列表中选择不生成报告的化合物自动化，并单击添加按钮 。 - d 单击方法编辑器中的保存方法图标。	• 如果需要，您也可以对这些操作进行测试。
10 关闭方法编辑器、方法管理器 和数据浏览器。 - 移动窗口，使得它们的外观类似于图 64 中的布局。 - 关闭数据文件，同时不保存结果。	- a 单击方法编辑器、方法管理器和数据浏览器的关闭按钮。 - b 移动窗口，使得它们的外观类似于图 64。 - c 单击文件 > 关闭数据文件。 - d 要求保存结果时，单击否。	• 有关如何移动窗口的信息，请参见练习 1 任务 4。
11 再次打开 sulfas_PosMS.d 数据文件，以运行自动化化合物识别。 - 结果应与图 64 中所显示的结果类似。 - 隐藏化合物列表中的化合物 1 和 4。	- a 单击文件 > 打开数据文件。 - b 选中从所选的方法中运行“打开文件”操作复选框。 - c 单击打开。 - d 清除化合物列表中化合物 1 和 4 的显示 / 隐藏复选框。	• 化合物 1 和 4 不是由数据库搜索算法发现的，但它们的分子式是由分子式生成算法生成的。

任务 3. 设置并运行方法，以使用 MS 目标化合物筛选工作流程自动化化合物识别操作

任务 3. 设置并运行可自动化化合物识别的方法（续）

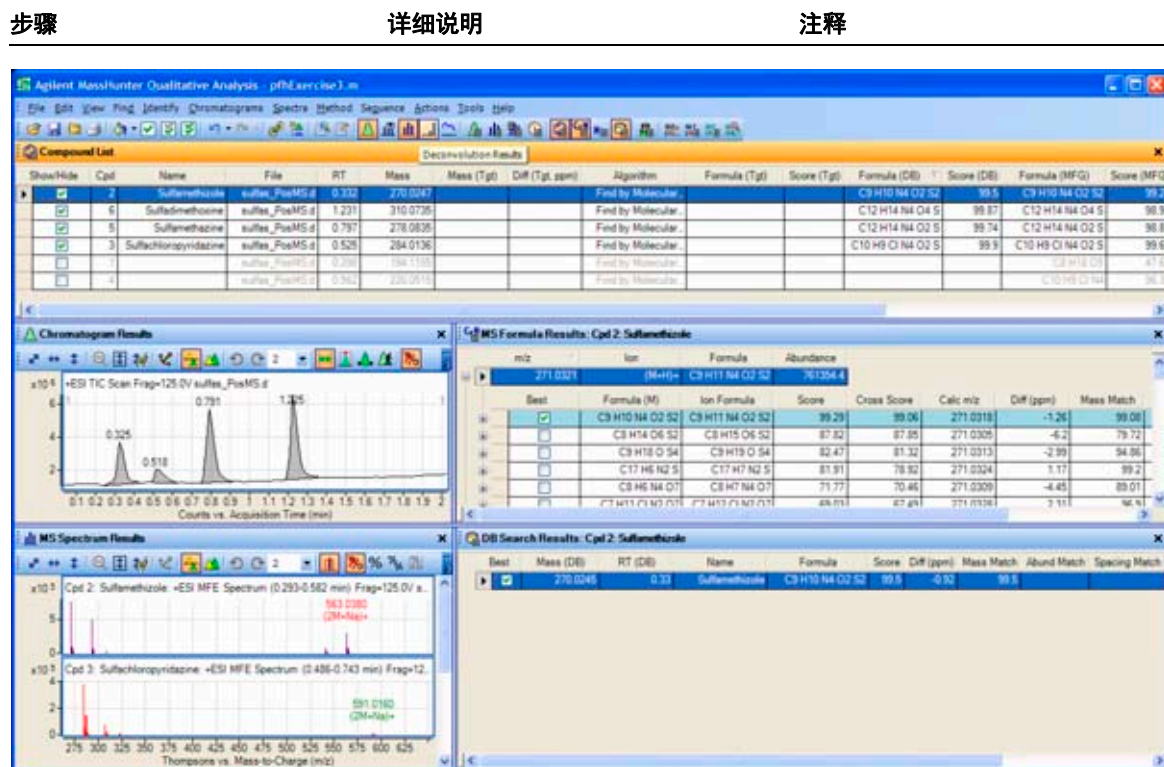


图 64 打开 sulfas_PosMS.d 数据文件时自动化化合物识别的结果

- 12 关闭数据文件，同时不保存结果。
- 单击文件 > 关闭数据文件。
 - 要求保存结果时，单击否。

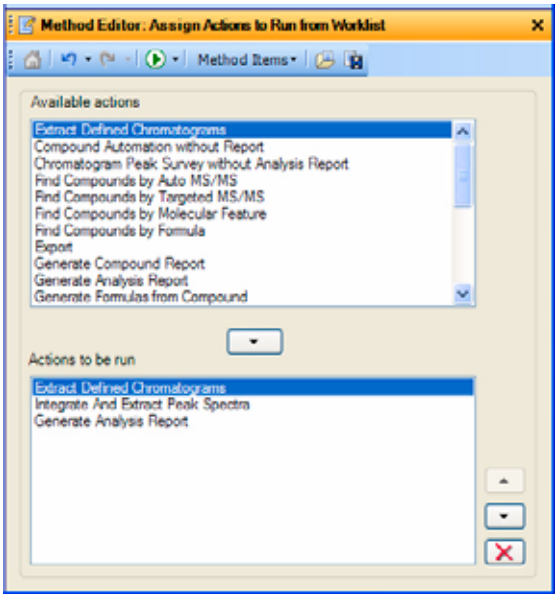
任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

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

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法

步骤	详细说明	注释
1 设置一个方法，使其在完成工作单中的每一个运行时都会自动执行。 - 使用任务 2 中保存的方法打开 sulfas_PosMS.d 数据文件。 - 确保在打开文件时不会运行这些操作。 - 恢复默认的窗口布局。 设置可执行下列任务的方法： - 提取所定义的色谱图 - 积分和提取峰质谱图 - 生成分析报告 提示：请查看方法管理器中的“工作单自动处理”部分。	a 单击文件 > 打开数据文件。 b 在“打开数据文件”对话框中，选择 sulfas_PosMS.d。 c 清除从所选的方法中运行“打开文件”操作复选框。 d 单击打开。 e 要恢复默认的工作流，可单击查看 > 配置工作流程 > 常规。 f 单击确定以继续。 g 调用方法 iiiExercise2.m。 h 选择工作单自动处理 > 工作单操作以显示指定要从工作单运行的操作部分。 i 确保下列操作按照此顺序显示在要运行的操作列表中： - 提取所定义的色谱图 - 积分和提取峰质谱图 - 生成分析报告 j 如有必要，请从可用操作列表中选择每一个操作，并单击添加按钮 ，以将选定的操作移动到要运行的操作列表中。您也可以在所选操作上双击，从而将其移动到其他列表。 k 如有必要，可从要运行的操作列表中选择任意不在上述列表中的操作，并单击删除图标 。	- 在此任务中，您将创建仅包含定性分析参数的方法。 - 要根据此方法创建工作单方法，必须在采集程序中将采集参数添加到此方法。 - 如果在“打开数据文件”对话框中选择调用工作单方法（假设其可用），则程序将使用生成数据文件的工作单中采集方法的定性分析部分打开数据文件。 - 您可以通过将定性分析参数保存到现有采集方法，从而可以同时使用采集参数和定性分析参数来创建工作单方法。 - 您也可以将方法设置为使用分析自动化步骤进行完整分析。随后删除这些操作，并添加到分析自动化操作中。 - 您可以对化合物自动化执行同样的操作。

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法（续）

步骤	详细说明	注释
		
	图 65 显示“工作单操作”窗口的的方法编辑器	
2 将方法保存到 <i>iiiexercise2worklist.m</i> , 其中“iii”表示您姓名的首字母。	a 要保存结果, 请单击方法 > 另存为。 b 键入 <i>iiiexercise2worklist.m</i>。 c 单击保存。 d 单击文件 > 退出。 e 系统提示您是否要保存结果时, 请单击否。	- 将采集参数添加到采集程序的此方法中之后, 即可用相同的名称或不同的名称将其保存。 - 从工作单运行时, 此方法 (包含所添加的采集参数) 将自动按照顺序采集并分析数据。“工作单操作”部分中的要运行的操作列表中的操作将自动运行。

3 使用不同的工作流程设置和运行定性分析方法

任务 4. 设置与工作单一起运行的定性方法



参考信息

- 使用窗口 108
- 处理“数据浏览器”中的结果数据 109
- 对色谱图执行操作 110
- 对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作 111
- 使用色谱图直观数据 111
- 工作流程 112
- 自定义报告模板 115

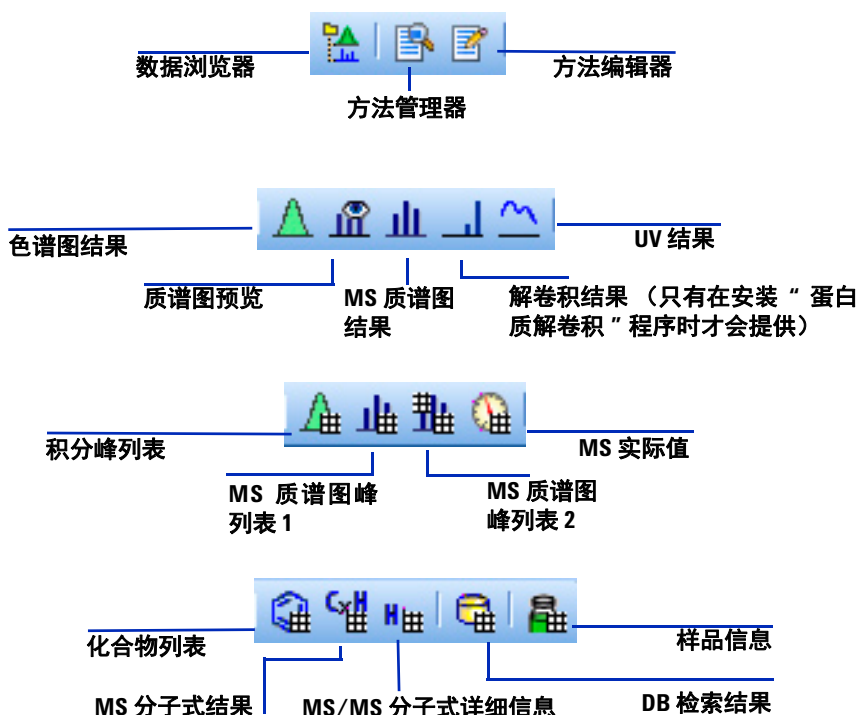


使用窗口

首次打开程序时，您会看到作为默认布局的三个窗口：“数据浏览器”、“方法管理器”和“色谱图结果”。您可以使用“查看”菜单打开其他 13 个窗口：“方法编辑器”、“质谱图预览”、“MS 质谱图结果”、“UV 结果”、“积分峰列表”、“MS 质谱图峰列表 1”、“MS 质谱图峰列表 2”、“MS 实际值”、“化合物列表”、“MS 分子式结果”、“MS/MS 分子式详细信息”、“DB 检索结果”，以及“样品信息”。此外，您还可以显示在开始使用关联工具时显示的工具窗口：“分子式计算器”、“质量计算器”和“重新校正”。

主工具栏上的窗口图标

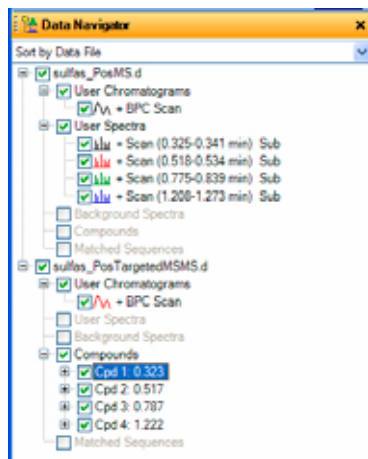
您可以使用主工具栏上的这些图标打开和关闭“定性分析”窗口。其他图标在安装 MassHunter BioConfirm 软件时提供。



处理“数据浏览器”中的结果数据

“数据浏览器”窗口和工具

“数据浏览器”按数据文件或数据类型对所有提取结果以及质谱图选择结果进行组织。



“链接导航”图标

激活时（默认），在“数据浏览器”中高亮显示色谱图的同时还将高亮显示对应的质谱图。此外，还会高亮显示对应的色谱图和质谱图直观结果。只有在使用“色谱图”菜单中的“积分和提取峰质谱图”菜单项或运行任何“化合物”算法时，“链接导航”才起作用。



检查标记工具

单选标记 – 选中所有高亮显示数据的复选框。

复选标记，其中一个显示为灰色 – 选中高亮显示数据的复选框并清除其他复选框。

复选标记 – 选中所有复选框。

如果选中了色谱图和质谱图的复选框，则将显示对应的色谱图和质谱图。

对色谱图执行操作

您可以使用相应的菜单项对整个色谱图或色谱图的选定范围执行下列操作：

操作	菜单项
提取色谱图	色谱图 > 提取色谱图
提取定义的色谱图	色谱图 > 提取定义的色谱图
积分色谱图	色谱图 > 对色谱图积分
积分和提取峰质谱图	色谱图 > 积分和提取峰质谱图
使色谱图平滑	色谱图 > 平滑色谱图
计算信噪比	色谱图 > 计算信噪比
使用自动 MS/MS 数据查找化合物	查找 > 按自动 MS/MS 查找化合物
使用目标 MS/MS 数据查找化合物	查找 > 按目标 MS/MS 查找化合物
针对 MS(1) 数据查找化合物	查找 > 按分子特征查找化合物
查找与特定分子式匹配的化合物	查找 > 按分子式查找化合物

从快捷菜单中选择范围操作

选择色谱图范围后，除上述操作以及没有提到的其他操作以外，您还可以提取质谱图并将质谱图提取到背景中。

- 1 要访问这些操作，请单击“色谱图结果”工具栏中的“范围选择”图标。
- 2 在要开始范围的点处单击鼠标左键，并将光标拖动到某个范围上，然后松开鼠标左键。
- 3 在色谱图中的任何位置单击鼠标右键，并单击快捷菜单中的操作。

将结果保存到数据文件中

- 单击**保存**图标，或单击**文件 > 保存结果**。

退出程序时，该程序还会询问您是否要将结果保存到数据文件中（除非您已关闭了此功能）。

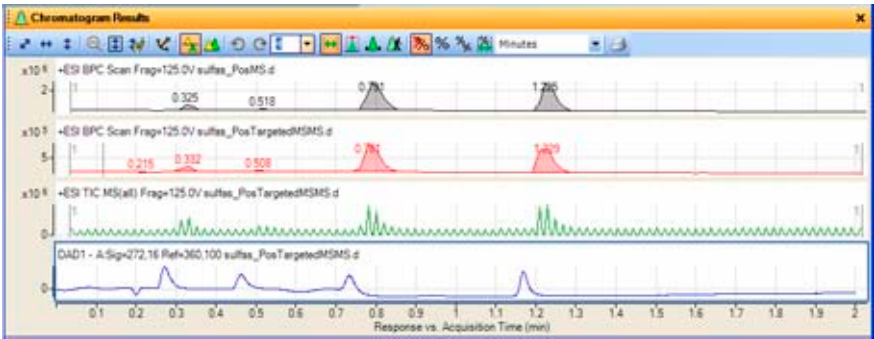
对 MS 或 MS/MS 质谱图执行操作

您可以使用相应的菜单项对 MS 或 MS/MS 质谱图或 MS 或 MS/MS 质谱图的选定范围执行下列操作：

操作	菜单项
查看有关质谱图的 m/z、丰度、电荷态和其他信息	查看 > MS 质谱图峰列表 1
扣除背景质谱图	质谱图 > 扣除背景质谱图
一同添加两个质谱图	质谱图 > 添加任何质谱图（然后单击其他质谱图）
检索数据库找到与质谱图中的特定质量匹配的化合物	质谱图 > 检索数据库以查找质谱图峰
为质谱图中选定范围内的质量生成分子式	质谱图 > 从质谱图峰生成分子式（在 MS 质谱图中选择某个范围时）
使用“已解析的同位素”算法执行解卷积	质谱图 > 解卷积（已解析的同位素）

使用色谱图直观数据

“ 色谱图结果 ” 窗口



色谱图结果工具

缩放工具 按顺序



对 X 轴和 Y 轴自动定标

对 X 轴自动定标

对 Y 轴自动定标

取消缩放

在缩放期间对 Y 轴自动定标

链接的 Y 轴模式

按顺序选择工具



要清除工具选择，
请单击其他工具或
图标。

范围选择 – 设置为“打开”状态时，您可以为对其执行操作的色谱图绘制范围

峰选择 – 设置为“打开”状态时，可以选择位于顶点处的积分峰的质谱图

手动积分 – 设置为“打开”状态时，可以执行交互式积分

行走色谱 – 设置为“打开”状态时，可以在单击每个点或使用键盘上的左右箭头时查看各个质谱图。

工作流程

工作流程可帮助您自定义应用程序的用户界面。每个工作流程均可调用具有适合于该工作流程的参数的方法。此外，每个工作流程还可以调用其他布局；这些布局中都包含针对每个表中显示的列所进行的自定义。最后，其中的四个布局还可以添加特殊的方法编辑器部分，该部分包含方法编辑器中对该工作流程非常重要的部分的副本。通过将特定工作流程中使用的功能组合在一起，您可以更方便地对方法进行自定义。

“定性分析”程序可提供五个不同的工作流程。它们是：

- 常规
- BioConfirm - 只有在安装 BioConfirm 软件并在“用户界面配置”对话框中选中该软件时，才可以使用此工作流程。
- 色谱图峰识别
- MS 目标化合物筛选
- 分子式确认和样品纯度

特定方法

每个工作流程均可以使用更适合该工作流程的设置来调用特定的默认方法。例如，如果切换到 BioConfirm 工作流程，则“按分子特征查找化合物”算法的**目标数据类型**将被设置为大分子（蛋白质、寡核苷酸）。此设置适合 BioConfirm 工作流程，但默认情况下不适合其他工作流程。

特定布局

此外，每个工作流程都会调用一个特定布局。布局包含下列内容：

- 每个窗口的位置和大小
- 哪些窗口将一同显示在选项卡中
- 哪些窗口处于浮动状态
- 选项卡中的哪个窗口位于顶部
- 哪些窗口默认情况下可见
- 状态栏是否可见

对于每个图谱窗口（“色谱结果”窗口、“质谱图预览”窗口、“MS 质谱图结果”窗口、“解卷积”窗口和“UV 结果”窗口），将保存下列信息：

- 图形是否重叠
- “在缩放期间对 Y 轴自动定标”模式是否处于打开状态
- “链接的 Y 轴”模式是否处于打开状态

对于每个表窗口，将保存下列信息

- 哪些列可见
- 列的顺序
- 每一列的宽度

“方法管理器”和“方法编辑器”中的特定部分

使用“方法编辑器”可以更改方法中的所有参数。四个工作流程中的每一个工作流程都会在“方法管理器”的开始位置添加一个部分。每个部分都包含该工作流程中有用的“方法编辑器”选项卡的重复副本。这些部分和选项卡已在“方法管理器”和“方法编辑器”窗口中提供；将它们组合在一起的目的只是为了便于您查看对该工作流程非常重要的部分。更改工作流程部分中的参数时，常规“方法编辑器”部分的对应部分内容中的参数也将随之更改。

常规“方法编辑器”部分中的两个选项卡不会重复。质谱图峰识别部分和数据库检索 > 检索标准选项卡仅包括在“色谱图峰识别”工作流程中。这些部分仅影响“色谱图峰识别”算法。此算法仅用于此工作流程中或者不生成报告的色谱图峰识别操作或生成分析报告的色谱图峰识别操作中。

BioConfirm 方法和布局

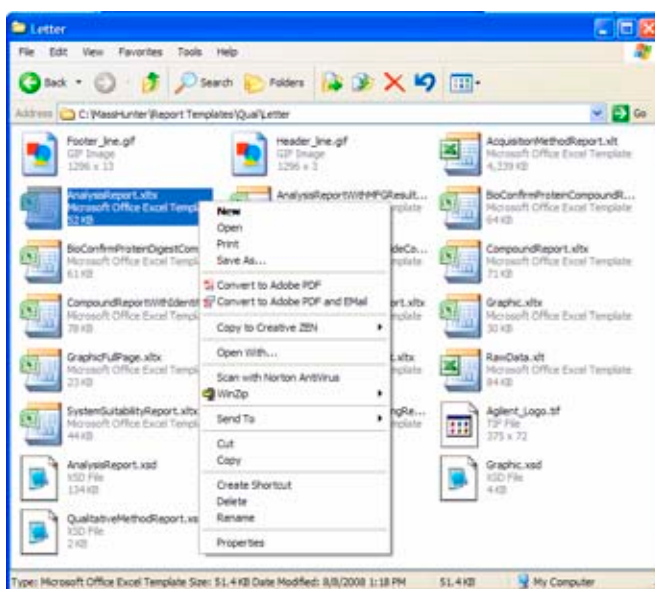
BioConfirm 软件提供了其他默认方法和布局，可用作创建您自己的“序列匹配”自定义方法的起点。

工作流程	方法	布局	“新建方法编辑器”部分
常规	default.m	Default.xml	无
BioConfirm	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm- IntactProtein- MaximumEntropy- Default.xml	BioConfirm 工作流程
色谱图峰识别	ChromPeakSurvey- Default.m	Default.xml	色谱图峰识别工作 流程
MS 目标化合物筛选	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS 目标化合物筛选 工作流程
分子式确认和样品 纯度	SamplePurity- Default.m	SamplePurity- Default.xml	分子式确认和样品 纯度工作流程

自定义报告模板

有关如何修改报告模板的详细信息，请参考 **MassHunter** 报告设计器加载项的联机帮助或《**MassHunter** 报告设计器快速入门指南》。通过执行下列步骤，您可以快速了解自定义模板的意义。

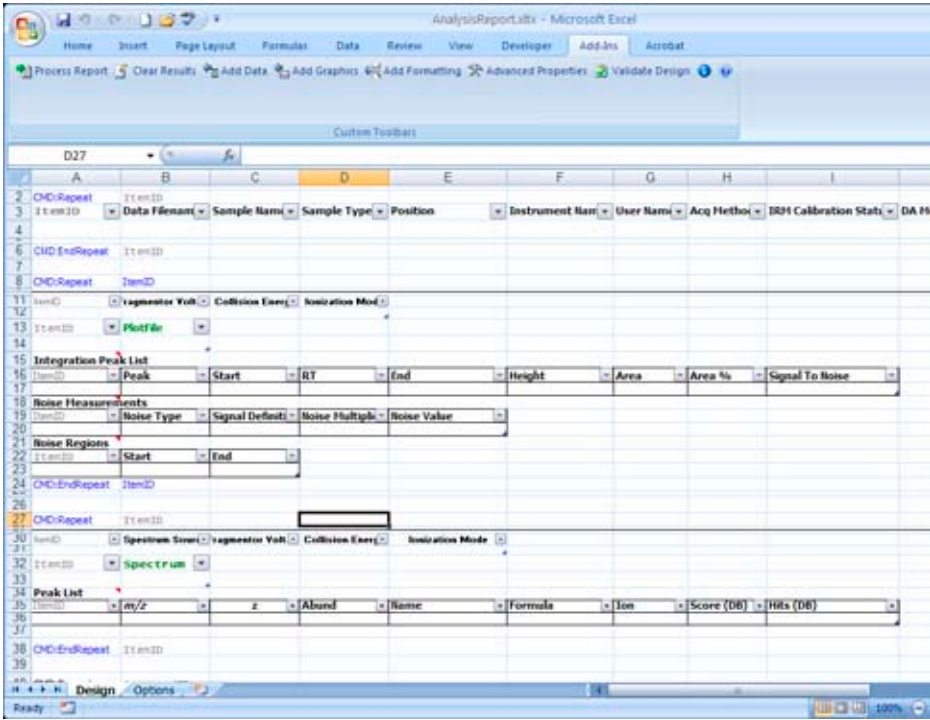
- 1 转到包含报告模板的文件夹。默认情况下，此文件夹为 **\MassHunter\Report Templates\Qual\Letter**。您可以在方法管理器中的“常规”>“公用报告选项”>“模板”选项卡中选择其他文件夹。
- 2 右键单击要修改的模板以显示快捷菜单，然后单击快捷菜单中的**打开**。



采用此方式打开模板，可使 **Excel** 了解此文件是否为模板文件。打开模板时，您可以修改页眉和页脚，并添加、删除或移动参数列。有关详细信息，请参考联机帮助。所有的“定性分析”模板都标记为“只读”。编辑模板之前，应更改此属性。

许多模板是随“定性分析”程序一同安装的。有关每个报告模板内容的详细信息，请参考“定性分析”联机帮助。

4 参考信息
自定义报告模板



- 3 执行所需的更改。
- 4 要保存新的模板，请单击 Microsoft Office 按钮中的另存为 > 其他格式。
- 5 键入标识名称，然后单击保存。

File name:	AnalysisReportCustom.xlsx
Save as type:	Excel Template (*.xltx)

www.agilent.com

内容提要

本指南包含有关学习如何使用 **Agilent MassHunter** 工作站软件 - 定性分析的信息。

© Agilent Technologies, Inc. 2008

第二版，2008 年 10 月

G3335-97060

G3335-97060



Agilent Technologies