

# Analyst MD 软件

高级用户指南



本文件供已购买 **SCIEX** 设备的客户在操作此 **SCIEX** 设备时使用。本文件受版权保护，除非 **SCIEX** 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 **SCIEX** 提供以用于整合到 **SCIEX** 的设备中，并不意味着 **SCIEX** 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

**SCIEX** 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 **SCIEX** 的唯一且独有的表述、保证和义务。**SCIEX** 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

供体外诊断使用。产品并非所有国家均可获得。了解更多信息，请咨询当地的销售代表或参阅 [sciex.com/diagnostics](http://sciex.com/diagnostics)。

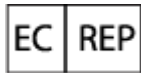
#### **Rx only.**

并非所有国家均可获得此（类）产品。若要了解更多信息，请联系您当地的代表或参考 [sciex.com](http://sciex.com)。

本文提及的商标和/或注册商标，包括相关标志，是 **AB Sciex Pte. Ltd.** 或各自所有者在美国和/或某些其他国家的财产(参见 [sciex.com/trademarks](http://sciex.com/trademarks))。

**AB Sciex™** 的使用经过许可。

© 2022 年 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH  
Ernst-Leitz-Strasse 17-37  
35578 Wetzlar  
Germany



爱博才思有限公司 **AB Sciex Pte. Ltd.**  
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3  
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

IVD

CE

UK  
CA

# 目录

---

<b>1 一般信息</b>	<b>7</b>
Analyst MD 软件事件	7
筛选系统日志以获得与 Analyst MD 软件相关的信息	7
Analyst MD 软件窗口	8
Analyst MD 软件模式	9
AnalystService	10
启动 AnalystService	10
停止 AnalystService	10
API Instrument 项目文件夹	10
程序文件	11
项目和子项目	11
子项目	11
项目组织	12
访问和安全	13
工作区	14
<b>2 调谐和校准模式</b>	<b>16</b>
调谐	16
校准	16
自动调谐和校正	17
(可选) 手动备份仪器参数	17
(可选) 恢复仪器参数	17
Compound Optimization	18
流动注射分析	18
输注	18
三通输注	18
<b>3 采集方法</b>	<b>19</b>
采集方法中的设备	19
添加或删除外围设备	19
设置 LC 泵属性	20
设置自动进样器属性	20
设置集成式注射泵属性	21
设置柱温箱属性	21
设置切换阀属性	21
设置二极管阵列检测器参数 (Agilent)	22
设置模数转换器属性	22
动态填充时间	22
实验和时段	23
实验	23
时段	23

信息相关采集方法 .....	24
Scheduled Ionization .....	24
溶剂可压缩性值 .....	26
注射器尺寸与流速之间的关系 .....	26
<b>4 批次 .....</b>	<b>28</b>
Batch Editor .....	28
导入批次文件 .....	29
在批次编辑器中设置定量详情（可选） .....	29
<b>5 定性数据分析 .....</b>	<b>30</b>
色谱图 .....	30
质谱图 .....	30
背景减除 .....	31
执行色谱图的背景减除 .....	31
解锁范围 .....	32
基线减除 .....	32
计算器 .....	32
Elemental Composition 计算器 .....	33
Hypermass 计算器 .....	33
Elemental Targeting 计算器 .....	33
Mass Property 计算器 .....	33
Isotopic Distribution 计算器 .....	33
访问计算器 .....	34
棒状图峰 .....	34
计算峰质心 .....	35
数据分析 .....	35
总离子色谱图 .....	35
提取离子色谱图 .....	35
基峰色谱图 .....	36
提取波长色谱图 .....	36
二极管阵列检测器 .....	36
总波长色谱图 .....	36
叠加图形 .....	36
在叠加图形之间循环 .....	36
叠加求和 .....	37
自定义图形 .....	37
向图形添加图注 .....	37
向图形添加文本 .....	37
化合物数据库 .....	38
等值线图 .....	38
查看等值线图 .....	39
在等值线图中选择一个区域 .....	40
在等值线图中设置强度和吸光度 .....	40
更改等值线图的颜色 .....	40
Dynamic Background Subtraction 算法 .....	40
碎片解读 .....	40
关联 Fragment Interpretation 工具与质谱 .....	41

---

将碎片与峰匹配 .....	41
在分子结构中选择一个键 .....	41
查看同位素 .....	42
在质谱中显示方程式差异 .....	42
在碎片列表中显示方程式差异 .....	42
在分子结构中显示方程式差异 .....	42
<b>IDA Explorer</b> .....	43
谱库数据库 .....	44
在现有谱库数据库之间切换 .....	44
创建本地谱库数据库 .....	45
连接服务器谱库数据库 .....	47
查看全部谱库记录 .....	49
向谱库添加纪录 .....	49
用限制条件搜索谱库记录 .....	50
谱库搜索提示 .....	51
搜索相似质谱 .....	51
从搜索结果中查看化合物 .....	52
已处理数据文件 .....	53
保存经过处理的数据文件 .....	53
打开经过处理的数据文件 .....	53
定性数据 .....	53
<b>Signal-to-Noise Ratio (信噪比)</b> .....	53
平滑算法 .....	54
用平滑算法平滑数据 .....	54
用高斯平滑算法平滑数据 .....	55
系统日志 .....	55
保存系统日志并转发给支持部门 .....	55
筛选系统日志以获得与 <b>Analyst MD</b> 软件相关的信息 .....	56
 <b>6 定性数据分析</b> .....	<b>57</b>
校正选项 .....	57
关于校正曲线 .....	57
选择最佳回归类型 .....	57
选择最佳加权系数 .....	58
积分算法 .....	58
<b>Analyst Classic</b> 和 <b>IntelliQuan</b> 积分算法 .....	58
定量方法创建工具 .....	60
向导程序 .....	60
<b>Quantitation Method Editor</b> .....	61
<b>Semi-Automatic Method Editor</b> .....	62
度量图表 .....	62
生成临时度量图表 .....	63
创建度量图表并保持绘图标准 .....	63
保存默认绘图标准供以后的结果表使用 .....	64
噪声和面积阈值参数 .....	65
重新计算噪声和面积阈值 .....	66
峰积分 .....	66
<b>Peak Review</b> .....	66
峰检查提示 .....	66

---

检测峰.....	67
找到潜在的峰起点.....	67
确认峰起点.....	68
找到峰顶.....	70
找到峰终点.....	72
单独的峰.....	73
查询.....	74
样本类型查询.....	74
默认查询和特定表查询.....	74
精度差异如何影响结果.....	75
回归方程.....	75
拟合选项.....	76
加权系数.....	78
报告模板.....	78
自定义报告.....	80
预览、打印和导出报告.....	80
结果表.....	81
查看结果表的具体布局.....	82
在结果表中排列数据.....	82
对结果表排序并保存排序标准.....	82
保存默认排序标准供以后的结果表使用.....	83
用预设排序标准对结果表排序.....	85
关于使用结果表查询.....	85
比较批次之间的结果.....	85
浓度水平对结果有何影响.....	85
结果表布局.....	85
结果表字段.....	88
结果表提示.....	94
<b>A 工具栏图标.....</b>	<b>96</b>
<b>B PPG 精确质量表.....</b>	<b>97</b>
联系我们.....	103
客户培训.....	103
在线学习中心.....	103
SCIEX 支持.....	103
网络安全.....	103
文档.....	103

本《高级用户指南》提供关于 **Analyst MD** 软件功能的信息。

## Analyst MD 软件事件

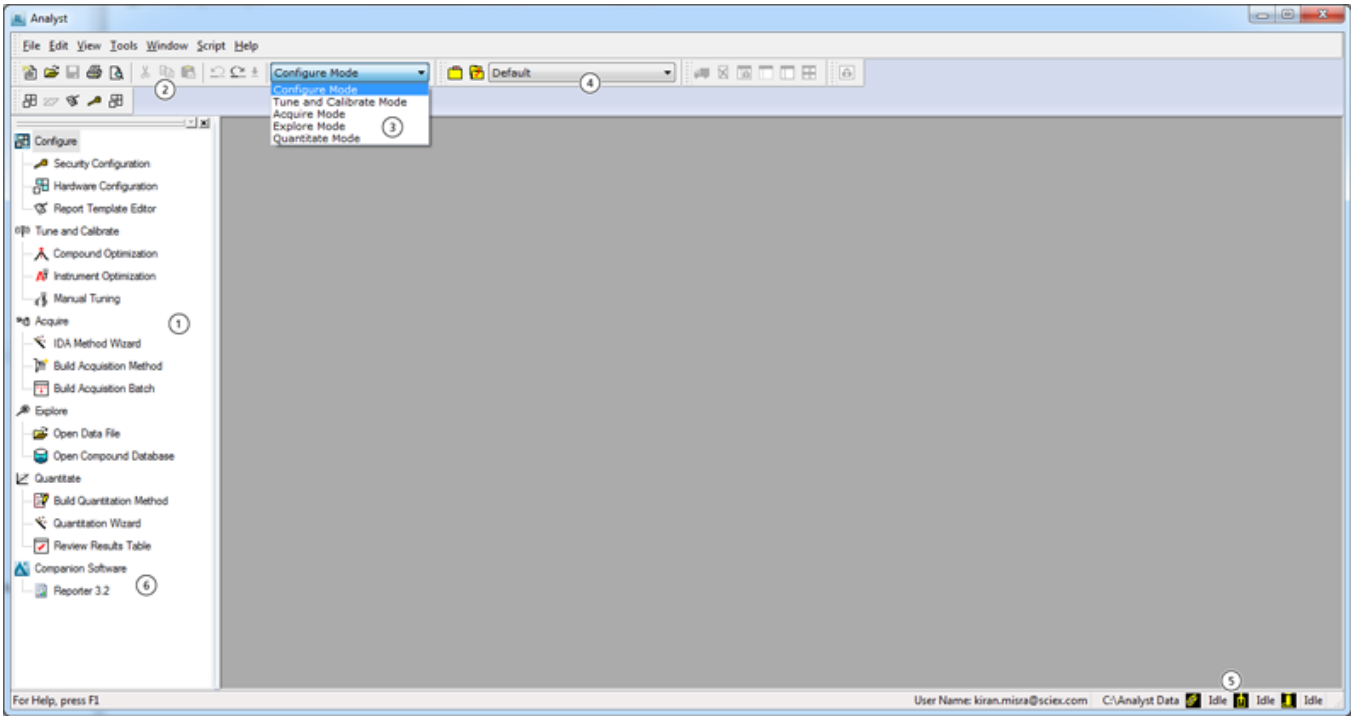
系统日志包含错误、警告和消息等系统事件的报告。使用 **Windows** 事件查看器可查看对于故障排除和执行系统诊断可能有用的信息。若要有效使用系统日志中的信息，过滤信息以仅显示与本软件相关的项。

## 筛选系统日志以获得与 **Analyst MD** 软件相关的信息

1. 单击 **View > Event Log**。  
Event Viewer 对话框随即打开。
2. 双击 **Windows Logs** 文件夹。
3. 单击 **Application**。
4. 单击 **Action > Filter Current Log**。  
Filter Current Log 对话框随即打开。
5. 选择 **Event Sources** 字段中的 **Analyst**。
6. 单击 **OK**。  
Event Viewer 对话框现在仅显示经过筛选的 **Analyst MD** 软件事件。

# Analyst MD 软件窗口

图 1-1 Analyst MD 软件窗口



项目	描述
1	<p>导航栏：使用导航栏可访问各种软件模式。用户可以根据他们的偏好自定义导航栏的某些元素。例如，用户可以重新调整其大小，移动或将其固定在位。若要隐藏导航栏，单击右上角的 x。若要查看导航栏，单击 <b>View &gt; Navigation Bar</b>。</p> <p>导航树的顶层具有代表每种软件模式的图标。双击特定模式的图标可展开或折叠树。这会显示或隐藏选定模式内可用功能的图标。</p>
2	<p>菜单栏：根据模式变化。某些选项（如剪切、复制和粘贴）在每个模式中都一样。其他选项专用于特定模式，在其他模式中不可用。</p>
3	<p>模式列表：单击可更改模式。不同模式具有不同的可用工具栏图标。</p>
4	<p>项目列表：单击可更改保存数据的项目。</p>
5	<p>仪器和外围设备状态：该状态栏包含关于当前激活的信息。它通过颜色描绘仪器的状态：绿色（就绪）、黄色（空闲）、红色（错误）或白色（无本地仪器工作站）。有一个图标会指示远程仪器的状态。双击该图标可打开设备状态窗口。</p>
6	<p>配套软件：包含从该软件打开的任何已安装的配套软件。</p>



## Analyst MD 软件模式

本软件被划分为各种模式，即独立的功能区，用户可以用这些模式来执行某个主要任务的一系列相关活动。用户可以通过导航栏或工具栏中的 **Mode** 列表来访问这些模式，也可以从一种模式切换到另一种，而且不会丢失任何工作。

表 1-1 Analyst MD 软件中的模式

名称	描述
<b>Configure</b>	（配置）使用此模式配置设备和系统设置。设置软件的各种选项和参数，包括硬件配置和报告模板设置。
<b>Tune and Calibrate</b>	（调谐和校准）使用此模式设置仪器调谐选项以确保最佳结果。在此模式下，用户可以： <ul style="list-style-type: none"><li>• 执行仪器优化。</li><li>• 执行手动调谐。</li><li>• 更改图形查看的外观，选择打开文件信息时显示的信息类型，并设置链接选项和其他外观选项。</li><li>• 更改处理选项。</li></ul>
<b>Acquire</b>	（采集）使用此模式设置用于确定样本采集方式的选项。在此模式下，用户可以： <ul style="list-style-type: none"><li>• 使用 IDA Method Wizard 创建 IDA 采集方法。</li><li>• 使用 Acquisition Method Editor 创建采集方法。</li><li>• 使用 Batch Editor 创建批次。</li><li>• 使用 Queue Manager 查看队列。</li><li>• 监控采集状态。</li></ul>
<b>Explore</b>	（浏览）使用此模式对样本执行定性分析。在此模式下，用户可以： <ul style="list-style-type: none"><li>• 查看图形。</li><li>• 查看色谱图。</li><li>• 查看质谱。</li><li>• 在批次采集过程中实时显示数据。</li></ul>
<b>Quantitate</b>	（定量）使用此模式分析所采集的数据并建立定量方法以生成结果表。使用结果表手动检查批次内每个分析物和内标物的所有峰，并查看校准曲线、样本统计数据和度量图表。

## AnalystService

AnalystService 是质谱仪与连接的设备之间的通信路径。AnalystService 随 Analyst MD 软件每次启动而启动。当用户登录至 Windows 时，AnalystService 自动启动。如果该服务未在 Analyst MD 软件启动时运行，则 AnalystService 将自动启动。

### 启动 AnalystService

如果 AnalystService 的 Startup Type 设置为 **Manual**，则在启动 Analyst MD 软件之前手动启动 AnalystService。不要更改 **Startup Type**。

1. 打开 Administrative Tools。
2. 双击 **Services**，然后单击 **AnalystService**。
3. 单击 **Start**。

### 停止 AnalystService

如果与仪器的通信存在问题，或者如果仪器与外围设备之间存在通信问题，停止 AnalystService。

1. 打开 Administrative Tools。
2. 双击 **Services**，然后单击 **AnalystService**。
3. 单击 **Stop**。

## API Instrument 项目文件夹

以下是 API Instrument 项目中的一些文件夹：

- **Bundler:** 内含的程序包括了数据文件（wiff 文件）的所有方面，并能够在样本完成时将这些方面自动组合在一起。
- **Configuration:** 内含所有硬件配置文件（hwprof 文件）。
- **Instrument Data:** 包含一个名为 InstrumentData.ins 的文件。该文件存储所有关键校准信息以及更多信息。
- **Method Tables:** 内含所有定义增强型扫描功能的仪器参数。请勿改变该文件夹中的文件。改变该文件夹的内容会影响增强型扫描模式的性能。
- **Parameter Settings:** 内含所有仪器参数和连接。仪器参数保存为 ParamSettingsdef.psf 文件。
- **Preferences:** 包含 Tunedata.tun 文件。所有设置（包括参数、调谐、仪器、处理、外观和队列）都保存为该文件夹的 Tunedata.tun 文件中。
- **Processing Scripts:** 包含 Explore 模式下的数据处理脚本。这些脚本可在 **Script** 菜单中找到。
- **Queue Data:** 包含来自队列的信息。
- **Tuning Cache:** 包含通过在 Manual Tuning 模式下单击 **Start** 而非 **Acquire** 创建的所有数据。文件以时间和日期戳记作为文件名保存。Tuning Cach 文件夹中可以保留有限数量的文

件，并会在必要时覆盖文件。如果需要保存这些文件，请使用新名称保存并立即移至别处。

## 程序文件

以下文件夹可在 Program Files\Analyst 文件夹（Windows 7，32 位操作系统）或 Program Files (x86)\Analyst 文件夹（Windows 7，64 位或 Windows 10，64 位操作系统）中找到。

- **bin:** 包含 Analyst MD 软件程序文件。该文件夹的内容不得改动，因为这会影响软件的功能。
- **binEx2:** 包含控制 ExionLC 2.0 设备所需的组件。
- **binEx:** 包含控制 ExionLC、Jasper、使用集成系统 Shimadzu LC-20/30 控制器控制的 Shimadzu LC20/30 设备以及 Shimadzu LC40 设备所需的组件。
- **Firmware:** 包含仪器系统固件配置表文件和仪器固件文件。更多信息，请参阅随软件提供的《软件安装指南》。
- **Help:** 包含帮助文件、指南、教程、《版本发布说明》和《软件安装指南》。
- **Scripts:** 包含用户可在需要时安装的脚本。这些脚本不会在安装 Analyst MD 软件的任何工作站上打开。更多信息，请参阅文档：《脚本用户指南》。
- **Simulation:** 包含在仿真模式下运行软件所需要的仪器数据文件。

## 项目和子项目

开始实验前确定实验相关文件的存储位置。使用每个实验的项目和子项目来更好地管理数据，并对结果进行对比。例如，可以使用子项目来保存特定日期的结果。

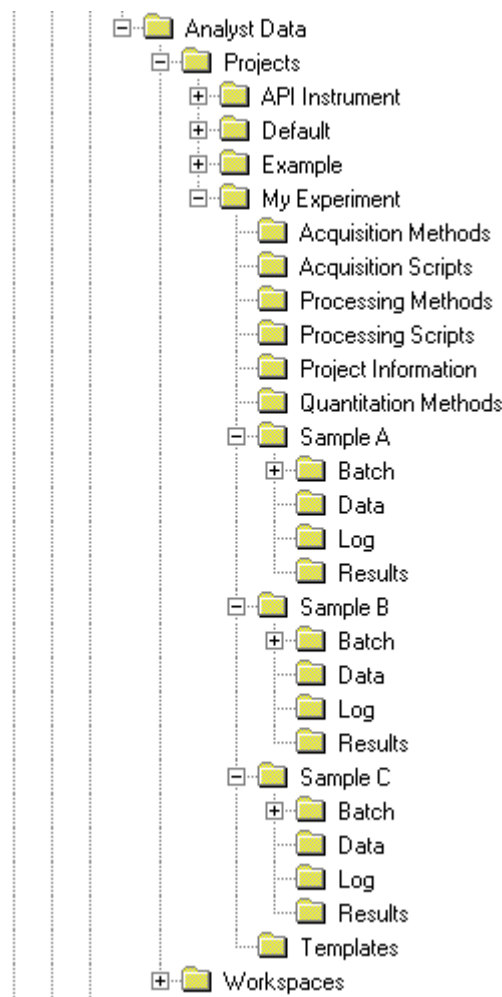
**注释:** 若要在项目内部使用子项目结构，就必须在第一次创建项目时创建至少一个子项目。用户无法在一个没有子项目结构的现有项目中创建子项目。

### 子项目

子项目中所包含的是项目的文件夹子集。所有子项目必须包含相同的文件夹。子项目对组织数据很有用。

例如，如果使用相同的采集方法运行来自不同实验室的各种化合物的样本，就可以创建子项目来保存每一个实验室的结果，而将采集方法文件夹留在项目中。这样，采集方法就可以在子项目或实验室中使用。或者，如果样本的分析时间长达数周，则可以将每天的结果存储在单独的子文件夹中。请参阅下图。

图 1-2 项目和子项目文件夹结构示例



## 项目组织

项目是一个用于组织和保存样本信息、数据、定量信息等的文件夹结构。每一个项目中有若干个文件夹，可包含不同类型的文件。比如，**Data** 文件夹中包含的是采集数据文件。请参阅下表，以获得关于不同文件夹中的内容的说明。

软件只能访问保存在根文件夹项下的项目。用户不能在一个已经被定义为根文件夹的文件夹中创建项目。

预设的根文件夹是安装软件的驱动器上的 **Analyst Data** 文件夹。若要将项目保存在其他地方，请创建新的根文件夹。有关根文件夹的更多信息，请参阅文档：《帮助》。

表 1-2 项目文件夹

文件夹	目录
\Acquisition Methods	包含所有可用的采集方法。采集方法文件具有 <b>dam</b> 扩展名。

表 1-2 项目文件夹 (续)

文件夹	目录
\Acquisition Scripts	采集脚本在 <b>Analyst MD</b> 软件中无法使用。此文件夹为空。  使用 <b>Analyst MD</b> 软件的脚本功能可以创建自定义脚本（自定义 <b>Analyst</b> 操作序列），但不应将其用作体外诊断设备的一部分。使用 <b>Analyst MD</b> 软件时所进行的软件内在检查不是在自定义脚本上执行的，并会导致结果与样本 ID 之间的链接不正确。
\Batch	包含所有可用的采集批次文件。采集批次具有 <b>dab</b> 扩展名。此文件夹还包含一个 <b>Templates</b> 子文件夹，其中包含了采集批次模板。批次模板文件的扩展名为 <b>dat</b> 。
\Data	包含采集数据文件，这些文件具有 <b>wiff</b> 扩展名。
\Log	包含定量和化合物优化结果。
\Processing Methods	包含使用的所有定性数据处理方法。
\Processing Scripts	包含数据处理脚本。保存在 <b>API Instrument</b> 项目中的处理脚本在 <b>Scripts</b> 菜单中显示。
\Project Information	包含所有项目信息和设置。此文件夹无法存储在子项目中。
\Quantitation Methods	包含使用的所有定量方法，它们具有 <b>qmf</b> 扩展名。
\Results	包含所有定量结果表文件，这些文件具有 <b>rdb</b> 扩展名。
\Templates	包含报告模板文件，这些文件具有 <b>rpt</b> 扩展名。

## 访问和安全

**Analyst MD** 软件需要与 **Windows** 管理工具的安全设置、应用和系统事件审核组件配合使用。

此外，该软件有多种用于配置和管理安全性的功能。软件管理员可以：

- 选择一种最适合运行环境需要的安全模式。
- 添加和删除用户与角色。
- 根据要求设置用户和角色的使用权限。
- 控制远程质谱仪的使用权限。
- 控制项目文件的使用权限。

有关软件安全的更多信息，请参阅文档：《实验室主管指南》。

注释：对软件安全性配置的更改在重启软件后生效。

# 工作区

工作区是一种包含相关文件的窗口和窗格的特定排布。例如，在处理某个数据集合时，用户可以打开各个窗口并更改窗口大小，以帮助进行分析。用户可以保存该排布或工作区，这样在下次查看数据时，就会有相同的窗口排布。

用户可以通过选择希望每个工作区包含的窗口和窗格来自定义工作区。用户可以更改窗口和窗格的大小和位置、将窗格锁定到一起，以及隐藏或显示某些窗格和窗口。使用这种方法，用户可以根据手头上的任务自定义工作区。

在 **Quantitate** 和 **Explore** 模式下，每个会话可以有多个工作区。用户可以保存工作区，该工作区中还可包括相关数据。当处于两种模式之一时，可以打开特定工作区，而无需退出该模式。为了将窗口和窗格的特定排布重复利用于其他数据集，用户可以将工作区保存为模板。在 **Tune and Calibrate** 或 **Acquire** 模式下，软件会自动保存工作区。

目的	方法
创建工作区	<div><div><div>1. 在导航栏上，单击将要在其中创建工作区的模式。</div><div>2. 打开要包含在工作区中的窗口和窗格，然后在屏幕上排布它们，将窗口锁定到一起，并根据需要调节窗口和窗格的大小。</div><div>3. 单击 <b>File &gt; Save Workspace</b>。</div><div>4. 在 <b>File name</b> 字段中，键入工作区的文件名。</div></div><div>注释: 工作区名称和路径总计不能超过 255 个字符。工作区名称后跟一个点和扩展名 <b>wws</b>，表示它是工作站文件。</div><div><div>5. 单击 <b>Save</b>。</div><div>工作区信息保存在指定目录下扩展名为 <b>wws</b> 的文件中。</div></div></div>
打开工作区	<div><div>在 <b>Quantitate</b> 和 <b>Explore</b> 模式下，可以在不退出当前模式的情况下打开不同的工作区。</div><div><div>1. 单击 <b>File &gt; Open Workspace</b>。</div><div>2. 从列表中选择适当的工作区，然后单击 <b>OK</b>。</div></div></div>
保存工作区	<div><div><div>1. 在 <b>Quantitate</b> 或 <b>Explore</b> 模式下，确保工作区处于活动状态。</div><div>2. 单击 <b>File &gt; Save Workspace As</b>。</div></div><div>提示! 单击 <b>Save Workspace</b> 以使用当前文件名和位置保存工作区信息。</div><div><div>3. 键入工作区文件的名称，然后单击 <b>Save</b>。</div><div>软件自动保存窗口和窗格信息，作为与当前模式相关的工作区的组成部分。在 <b>Configure</b>、<b>Tune and Calibrate</b> 或 <b>Acquire</b> 模式下，当用户关闭当前模式时，软件会自动保存工作区。</div></div></div>

---

目的	方法
锁止软件	1. 在工具栏上，单击 <b>Lock Application</b>  。

调谐和校准质谱仪可获得最高的分辨率和强度性能。

在调谐期间可以执行下列任务：

- 调整分辨率偏移值，以调节校准质量的强度和分辨率（仅针对四极杆模式）。
- 选择待校准的质量。如果需要，可以向校准列表中添加和从中移除质量。
- 创建一个或多个专用的校准标准集。校准标准集至少应包含两种化合物，代表目标质量范围的高低端。

调谐和校准后的仪器可以检测指定的样本峰分辨率和质量数确定值。此过程通过使用已知的校准标准物，例如 **PPG**（聚丙二醇）来实现。校准标准物用于校准质量标度，以在可接受的质量偏移内检测尽可能接近其准确质荷比的目标离子。除了确定准确的峰之外，用户还可以调整分辨率以获得最佳峰宽和峰形状。

正确调谐和校准的质谱仪可为在该质谱仪中分析的任何样本或化合物提供最佳的结果。调谐和校准联合执行，与优化无关。调谐和校准的重点是分辨率和质量校准。优化的重点是灵敏度。

在调谐和校准过程中对质谱仪配置的更改保存在 **API Instrument** 文件夹内的数据文件中。**SCIEX** 现场服务人员 (**FSE**) 曾优化过 **API Instrument** 方法文件夹中的预设参数，因此应使用这些参数。

在调谐和校准之后，系统性能达到最高，指定的参数成为所有实验的默认参数。用户运行实验时可以使用优化过的离子源相关参数和化合物相关参数，以最大化任何分析物的响应。

---

**提示!** 定期清洁 **Q0** 区，以尽量减少带点效应（在很短的时间内相关离子的灵敏度出现明显降低）对四极杆的影响。请参阅文档：《合格维护人员指南》。

---

用户可以选择自动或手动调谐和校准仪器。

自动调谐：软件使用 **Instrument Optimization** 向导执行分辨率优化和质量校准。对于线性离子阱 (**LIT**) 仪器，还会执行 **MS<sup>3</sup>** 优化。

手动调谐：用户可以手动执行许多仪器分辨率优化和校准。

## 调谐

调谐质谱仪是优化分辨率和仪器参数以使质谱仪达到最佳灵敏度和性能的过程。定期或在系统性能下降时调谐和校准质谱仪。优化质谱仪以使新样本或化合物的响应最大化。优化分辨率包括调整峰宽和峰形。

## 校准

质量校准是将正确的质荷比 (**m/z**) 值分配到质量峰的过程。使用聚丙烯乙二醇 (**PPG**) 等校准标准物执行质量校准后，可以将结果与先前的校准进行对比，以确定观察到的谱峰 **m/z** 值与理论值的接近程度。先前的校准可以更新，或者更常见的是替换为新校准。



校准 Q1 和 Q3 时可以选择多个质量以及各极性的所有 LIT 扫描。结果储存于校准表中。执行质量校准时，校准表使用来自新校准的数模转换器 (DAC) 值或校准表中已有的质量进行更新。当前校准中，与未经校准的质量有关的所有数据将被保留。如果替换质量校准，则将替换所有质量的所有先前校准值。使用新采集的质谱执行质量校准，或使用来自存储的数据文件的质谱。

## 自动调谐和校正

Instrument Optimization 是自动仪器调谐软件，可调谐四极杆和 LIT 模式，及执行质量校正。对于四级杆模式来说，它可以调节分辨率偏置。对于 LIT 模式而言，它可以优化 AF3 和 EXB。对 MS<sup>3</sup> 而言，它可以调整激励和隔离系数。选择以下仪器性能选项之一：

- **Verify instrument performance:** 测试仪器性能，但保持仪器设置不变。在测试结束时生成报告。每周使用此选项一次来检查仪器的性能。
- **Adjust mass calibration only:** 自动检查和调整质量校正。如果质量校正已更改，则软件会修正它。对 LIT 仪器每周或每月使用此选项一次，以检查并根据需要调整质量校正。
- **Adjust instrument settings:** 检查并调整仪器设置和质量校正。仪器设置将从当前设置更新为最佳设置。如果仪器性能差，或者如果峰形不佳，使用此选项。只有有经验的用户才可调整仪器设置。

---

注释: 旧 LIT 方法必须更新新设置。在 Advanced MS 选项卡中切换 LIT 速度，然后保存方法。

---

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** 将仪器值重置为出厂预设值。如果更换了仪器的主要组件或在初次安装后，选择此选项。仅应由 FSE 使用此功能。

## (可选) 手动备份仪器参数

备份当前仪器参数，以防以后必须恢复它们。手动备份仪器参数的预设位置为  
<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups。

1. 在导航栏上的 **Tune and Calibrate** 下，双击 **Instrument Optimization**。
2. 单击 **File > Backup Instrument Settings**。
3. 键入文件名。
4. 单击 **Save**。

## (可选) 恢复仪器参数

1. 在导航栏上的 **Tune and Calibrate** 下，双击 **Instrument Optimization**。
2. 单击 **File > Restore Instrument Settings File**。
3. 导航至要恢复的仪器设置。
4. 单击 **Open**。

## Compound Optimization

**Compound Optimization** 软件向导程序可以自动优化分析物。样本可通过输注或 **FIA**（流动加注分析）来加注。软件首先会检测化合物是否存在。逐渐增大或减小不同离子路径电压参数，确定每一离子的最大信号强度（**Q1** 扫描）。在优化过程中会生成并显示一个文本文件。这一文件记录了执行的多种实验以及每一个离子光学参数的最优值。此外，还生成了包含所有已执行实验的文件夹，以 **Explore**（浏览）模式打开数据文件夹即可找到此文件夹。对于执行的每个实验，还生成了一种采集方法，将其保存在采集方法文件夹中。

## 流动注射分析

流动注射分析 (**FIA**) 是指通过自动进样器向 **LC** 流中加注少量样本。在 **FIA** 优化过程中，对加注之间改变的各种离子源、化合物或者两者兼有的条件性参数要进行多次加样。**FIA** 通过进行连贯的环回实验（即一个化合物条件性参数接着下一个化合物条件性参数）来优化去簇电压、碰撞能量和碰撞池的出口电压。它通过每个参数进行依次加样的方式对离子源条件性参数进行优化。

用 **FIA** 优化方式可以优化在高流速下使用液相色谱的化合物条件性参数和离子源条件性参数。

## 输注

输注是指使用注射泵以低流速使样本连续流入离子源。在输注的优化过程中，软件可以选择前体和产物离子，并为二者优化去簇电压、碰撞能量和碰撞池出口电压。逐渐增大或减小这些离子路径电压参数，确定前体和产物离子的最大信号强度。

只有在比 **LC/MS** 分析过程中所使用的流速更低的流速下，才能使用输注优化方法优化化合物条件性参数。

## 三通输注

三通输注（或分路输注）是指通过离子源上的三通接地接头以低流速注入离子源的连续样本流。三通接地接头连接到带红色 **PEEK** 管线的注射泵以及 **LC** 泵。

从现有的文件创建采集方法文件时，用户可以使用原采集方法中的部分或全部设备方法。使用 **Acquisition Method Editor** 可通过添加或删除设备方法来自定义采集方法。如果需要的设备图标不在 **Acquisition Method Browser** 窗口内，那么只能添加当前活动的硬件配置文件中所包含的设备。

我们建议，只有精通方法开发的用户才可创建或修改采集和定量方法。有关角色和安全性的更多信息，请参阅文档《实验室主管指南》中的“关于人员与角色”一节。

## 采集方法中的设备

通过选择外围设备的工作参数可创建该设备的采集方法。以下任何设备，只要在活动的硬件配置文件中进行了配置，都可以为之创建采集方法：

- 泵
- 自动进样器
- 注射泵
- 柱温箱
- 切换阀
- 二极管阵列检测器
- 模数转换器
- 一体化系统

有关设置设备属性方面的内容，请参阅文档：《外围设备设置指南》。

---

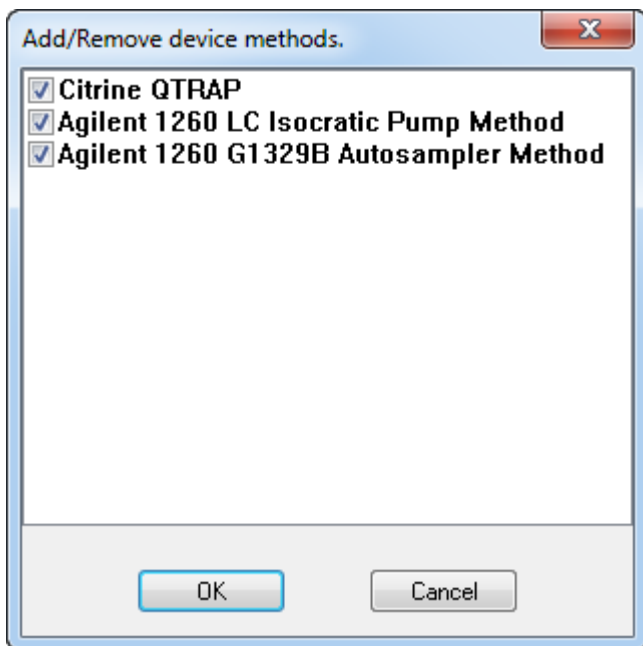
注释: LC 设备的可用参数视不同的生产厂商而有所不同。

---

## 添加或删除外围设备

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个方法文件的情况下，在 **Acquisition method** 窗格中，右键单击 **Acquisition Method**，然后单击 **Add/Remove Device Method**。  
**Add/Remove Device Method** 对话框随即打开，其中显示在活动硬件配置文件中配置的设备。

图 3-1 Add/Remove Device Method 对话框



2. 通过选择或清空设备方法旁边的复选框来添加或删除设备方法。
3. 单击 **OK**。

## 设置 LC 泵属性

1. 在 Acquisition Method Editor 打开了一个采集方法文件的情况下，在 Acquisition method 窗格中执行以下操作之一：
  - 对于 Agilent 泵，单击 **Pump** 图标。
  - 对于使用集成系统 Shimadzu LC 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备，单击 **Shimadzu LC System**。
  - 对于使用集成系统 Shimadzu LC-20/30 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备、Shimadzu LC 40 设备、ExionLC 设备、ExionLC 2.0 设备或 Jasper LC 设备，单击 **LC System**。
2. 如果尚未选中右侧窗格中的 LC 泵选项卡，将其选中，然后根据需要编辑属性或设置。
3. 保存文件。

## 设置自动进样器属性

1. 确保在 Acquisition Properties 选项卡上将 **Synchronization Mode** 字段设置为 **LC Sync**。设备、进样和仪器采集将同时开始。
2. 在 Acquisition Method Editor 打开了一个方法文件的情况下，在 Acquisition method 窗格中执行以下操作之一：
  - 对于 Agilent 自动进样器，单击 Agilent Autosampler 图标。
  - 对于 CTC Pal 自动进样器，单击 CTC PAL Autosampler 图标。

- 对于使用集成系统 Shimadzu LC 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备，单击 **Shimadzu LC System**。
  - 对于使用集成系统 Shimadzu LC-20/30 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备、Shimadzu LC 40 设备、ExionLC 设备、ExionLC 2.0 设备或 Jasper LC 设备，单击 **LC System**。
3. 打开右侧窗格中的 **Autosampler** 选项卡，然后根据需要编辑属性或设置。
  4. 保存文件。

## 设置集成式注射泵属性

该程序适用于内置式注射泵系统。

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个采集方法文件的情况下，单击 **Acquisition Method Browser** 窗格中的 **Syringe Pump** 图标。  
**Syringe Pump Method Properties** 选项卡会在 **Acquisition Method Editor** 窗格中打开。
2. 按需要编辑字段。
3. 保存文件。

## 设置柱温箱属性

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个采集方法文件的情况下，在 **Acquisition method** 窗格中执行以下操作之一：
  - 对于 **Agilent** 柱温箱，单击 **Agilent Column Compartment** 的图标。
  - 对于使用集成系统 Shimadzu LC 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备，单击 **Shimadzu LC System**。
  - 对于使用集成系统 Shimadzu LC-20/30 控制器激活的 Shimadzu LC 20/30 设备、Shimadzu LC 40 设备、ExionLC 设备、ExionLC 2.0 设备或 Jasper LC 设备，单击 **LC System**。
2. 如果尚未选中右侧窗格中的柱温箱选项卡，将其选中，然后根据需要编辑属性或设置。
3. 保存文件。

## 设置切换阀属性

切换阀可作为分流阀或进样阀使用。如果将阀门作为进样器使用，请选择 **Manual Sync with Valve** 同步模式。如果将阀门作为分流阀使用，则选择任何其他模式。

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个方法文件的情况下，单击 **Acquisition method** 窗格中的 **Valve** 图标。  
**Valve Properties** 选项卡随即在 **Acquisition Method Editor** 窗格中打开。
2. 必要时，可更改预设位置名称。  
切换阀有时被用来将溶剂流切换至废弃物或另外的色谱柱。预设位置名称为 **A** 和 **B**。
  - 在 **Change Position Names** 列表选择一个位置。

- 在 **Change Position Names** 列表中，根据阀门的连接方式重命名预设位置名称。如果阀门用作进样器，则将 A 和 B 重命名为 **Inject** 和 **Divert** 或 **Column** 和 **Waste**。如果阀门用作分流阀，则将 A 和 B 重命名为 **Divert** 和 **Inject** 或 **Waste** 和 **Column**。
3. 在 **Total Time (min)** 列中，单击某个单元格，然后键入阀门将保持在该位置的总时间。
  4. 在 **Position** 列中单击某个单元格，然后在 **Position** 列表中选择阀门位置。
  5. 对采集期间所需要的每一次阀门切换，重复第 3 步和第 4 步。
  6. 保存文件。

## 设置二极管阵列检测器参数 (Agilent)

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个采集方法文件的情况下，单击 **Acquisition method** 窗格中的 **Agilent Diode Array Detector** 图标。  
**Agilent DAD Method Editor** 选项卡随即在 **Acquisition Method Editor** 窗格中打开。
2. 按需要编辑属性。
3. 保存文件。

## 设置模数转换器属性

1. 在 **Acquisition Method Editor** 打开了一个方法文件的情况下，单击 **Acquisition method** 窗格中的 **Analog to Digital Converter (ADC)** 图标。  
**Analog/Digital Converter Properties** 选项卡随即在 **Acquisition Method Editor** 窗格中打开。
2. 在 **Sample** 部分的 **Rate (pts/sec)** 字段中键入流速。

---

注释: 间隔时间与流速彼此成正比。更改流速时，软件会再次自动计算间隔时间。

---

3. 请按以下方式设置通道详情：
  - a. 在 **Channels** 字段中，单击通道名称，然后勾选名称旁边的复选框，将其包含在方法内。
  - b. 在 **Interpreted Value @ Full Scale** 字段中键入相应值。
  - c. 在 **Interpreted Unit** 字段中键入相应的单位。

可用通道数是在硬件配置文件中设置 **ADC** 时指定的。

4. 保存文件。

## 动态填充时间

**Dynamic Fill Time (DFT, 动态填充时间)** 是一种专门设计的功能，旨在优化每个质谱中获取的、用于线性离子阱扫描功能的数据。**DFT** 可以根据来自离子源的离子流量，自动调整用于填充离子阱的填充时间。对于强度更高的离子，填充时间会自动减少，以保证离子阱没有被离子过度填充。

对于强度较低的离子，填充时间会自动增加，以保证质谱中获得较好的离子统计结果。**DFT** 适用于以下扫描类型：

- 增强型 MS (EMS)
- 增强型分辨率 (ER)
- 增强型产物离子 (EPI)
- MS/MS/MS (MS<sup>3</sup>)

用户可以通过在软件中选择 **Tools > Settings > Method Options** 来调整 DFT 设置。

## 实验和时段

质谱仪采集方法包含实验和时段。在 **Acquisition Method Browser** 窗格中，创建一个质谱仪的采集时段和实验序列。或者，打开以前在 **Tune Method Editor** 中创建的方法。

### 实验

实验包括 MS 扫描期间的质谱仪设置和扫描类型。运行一定时间量内的一整套 MS 扫描被称为时段。在整个持续时间内 MS 参数和动作都相同的采集方法被称为单时段、单实验方法。

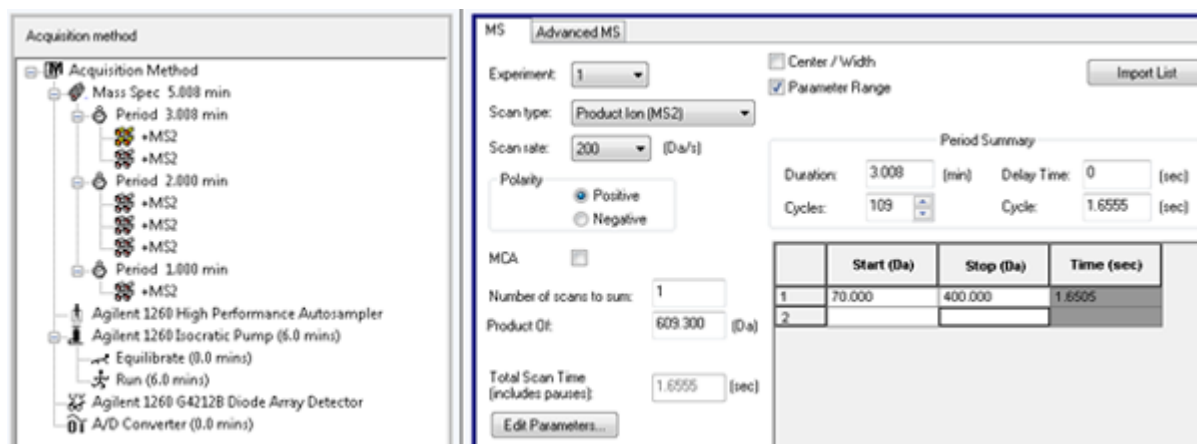
在环回实验中，MS 设置是按逐次扫描而改变的。比如，如果样本中含有两种化合物 A 和 B，用户可能希望用化合物 B 的 MS/MS 实验重复一遍化合物 A 的 MS/MS 实验，以获得两种化合物在相同运行中的信息。质谱仪方法将在两次扫描类型之间交替。环回实验的其他例子包括在样本运行和信息相关采集 (IDA) 方法中正、负模式之间的交替。

### 时段

一个时段中可以包括一个或多个环回实验。在一个多时段采集方法中，实验要进行一定的时间量，然后软件换到另一组实验。在知道 LC 运行中化合物的洗脱时间的情况下，时段是很有用的。质谱仪可根据化合物的洗脱时间来进行不同实验，从而在相同的运行中尽可能获取更多信息。

下图显示了包含三个时段的方法。

图 3-2 多时段实验示例



## 信息相关采集方法

IDA 方法可以根据从以前周期中获得的结果，自动运行实验。在采集数据的同时用 IDA 标准优化数据采集设置项，可以缩短单次加样的样本采集时间。使用 IDA，用户可同时节省所需要的样本量和宝贵的工作时间。

在单个时段中创建一个最多有两次全谱扫描和最多 8 个最强峰的条件性扫描的 IDA 方法。全谱扫描在 IDA 中用于触发其他实验。以下扫描类型可用作全谱扫描：

- 增强型产物离子 (EPI) (第二级全谱扫描)
- 增强型 MS (EMS)
- 多反应监测 (MRM) 或 *Scheduled* MRM 算法
- 中性丢失 (NL)
- 前体离子 (Prec)
- Q3 MS

以下扫描类型可用作条件性扫描：

- EPI
- MS/MS

在 IDA 方法采集过程中，质谱仪的动作会根据之前周期中所采集的数据因不同扫描而异。软件会在数据采集时对其进行分析，然后确定进行条件性扫描的质量。用户可以设置激活 IDA 实验的标准以及拟采用的方法参数。

IDA 方法采集通基于以下用户定义的条件运行条件性扫描来改进结果：

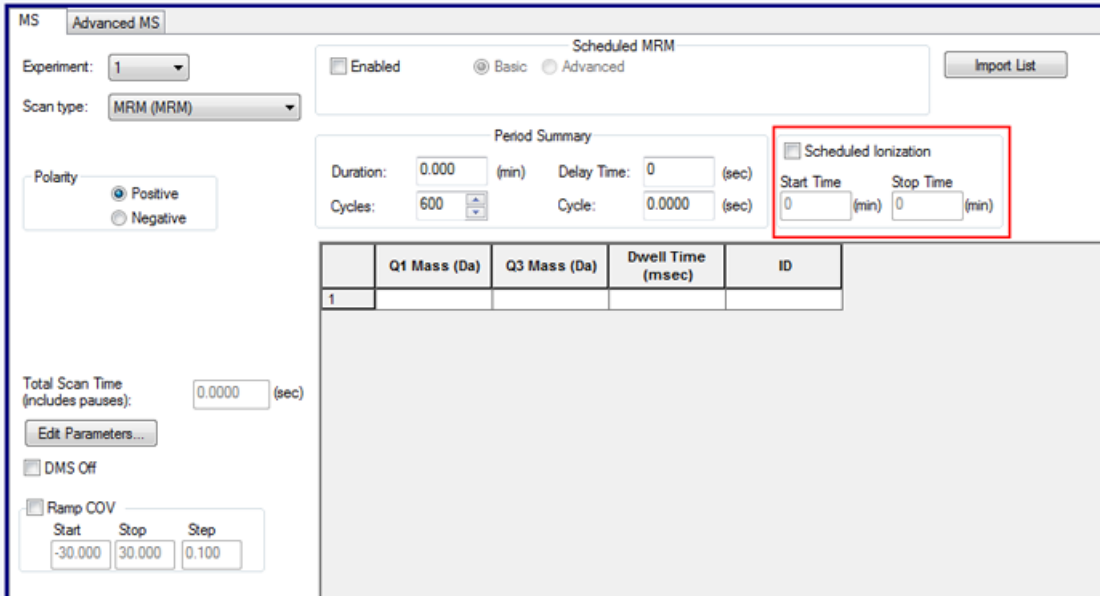
- 离子强度和电荷状态
- 包含和排除列表
- 同位素形式
- 动态排除
- 离子强度的变化速度（请参阅以下章节：[Dynamic Background Subtraction 算法](#)。）

## Scheduled Ionization

Scheduled Ionization 功能可降低污染风险，从而减少质谱仪停工时间。该功能在 Acquisition Method Editor 中可用，并可用于使用单时段采集方法的批量采集。请参阅下图。



图 3-3 Acquisition Method Editor 中的 Schedule Ionization



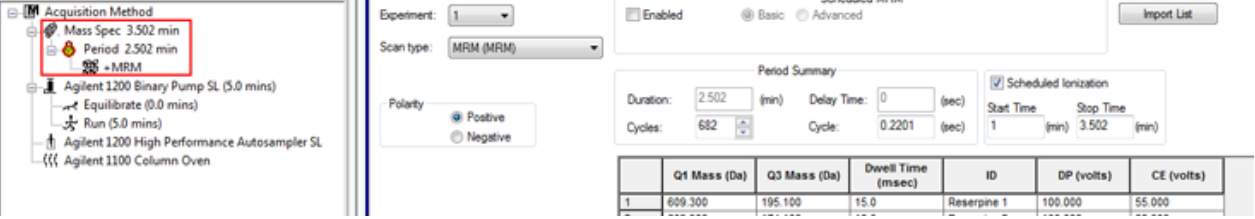
当选择了 **Scheduled Ionization** 并为 **Scheduled Ionization** 设置了 **Start Time** 和 **Stop Time** 时, **IonSpray Voltage (ISV)** 仅在所关注峰洗的 **Start Time** 和 **Stop Time** 之间设置为采集方法中指定的 **ISV** 值。在 **Start time** 之前和 **Stop time** 之后, **ISV** 设置为 0。LC 方法应照往常一样设置。例如, 如果 LC 持续时间设置为 5 分钟, **Scheduled Ionization** 设置为在 1.5 分钟开始, 在 3.5 分钟停止, 则 LC 在 0 分钟启动, 在 5 分钟停止, 而质谱仪数据采集在 1.5 分钟开始, 然后在 3.5 分钟停止。**Scheduled Ionization** 也可用于 **Nebulizer Current (NC)**, 前提是 Turbo V 或 IonDrive Turbo V 离子源在 APCI 模式下使用时。

选择了 **Scheduled Ionization** 功能的采集方法的 **Start Time** 和 **Stop Time** 应根据使用相同的采集方法但未选择 **Scheduled Ionization** 采集的数据来确定。

注释: **Stop Time** 必须大于 **Start Time**。

注释: 如果选中了 **Scheduled Ionization** 复选框, 则 **Mass Spec** 时间为 **Stop Time**, 即预定的停止离子化的时间。Acquisition Method Editor 中显示在 **Period** 旁边的时间是 **Duration** 字段中显示的值。请参阅下图。

图 3-4 选择了 **Scheduled Ionization** 时的质谱仪时间



## 溶剂可压缩性值

表 3-1 溶剂可压缩性值

溶剂	可压缩性 ( $10^{-6}/\text{bar}$ )
丙酮	126
乙腈	115
苯	95
四氯化碳	110
氯仿	100
环己烷	118
乙醇	114
醋酸乙酯	104
庚烷	120
己烷	150
异丁醇	100
异丙醇	100
甲醇	120
1-丙醇	100
甲苯	87
水	46

## 注射器尺寸与流速之间的关系

注射泵的流速取决于泵上所安装的注射器。下表显示了流速与注射器尺寸之间的关系。

表 3-2 注射器规格与流速（单位：L/小时）

注射器规格 ( $\mu\text{L}$ )	L/小时（最小值）	L/小时（最大值）
0.5	.002	23.8
1.0	.003	47.8
2.0	.006	95.2
5.0	.015	238.0
10.0	.029	474.0
25.0	.073	1193.0

表 3-3 注射器规格与流速（单位：μL/分钟）

注射器规格 (μL)	μL/分钟（最小值）	μL/分钟（最大值）
50	.002	39.7
100	.005	79.7
250	.012	197.8
500	.024	397.0
1000	.048	795.0
1.0	.049	805.0

表 3-4 注射器规格与流速（单位：mL/小时）

注射器规格 (mL)	mL/小时（最小值）	mL/小时（最大值）
2.0	.011	186.8
2.5	.010	168.2
3.0	.011	181.4
5.0	.019	317.0
10.0	.028	461.0
20.0	.050	821.0
30.0	.074	1208.0

表 3-5 注射器规格与流速（单位：mL/分钟）

注射器规格 (mL)	mL/分钟（最小值）	mL/分钟（最大值）
50.0	.002	28.40
100.0	.003	47.60
140.0	.004	55.10

一个批次是指关于待分析样本的信息集合。样本通常分组为不同的集合以简化提交。将样本组成集合还可以减少必须手动输入的数据量。一个样本集可包含单个样本或多个样本。一个批次中的所有集合均使用相同的硬件配置文件。不过，一个集合中的样本可以有不同的采集方法。批次只能从采集工作站减除。

批次包括以下信息：

- 样本信息，如名称、ID、数据文件名称和评注
- 自动进样器位置（支架信息）、进样瓶位置
- 采集方法和注射体积
- 定量方法（可选）
- 定量信息（可选）
- 自定义样本信息（可选）
- 数据集合信息。

Batch Editor

使用 **Batch Editor** 可创建或修改批次及创建批次模板。若要运行的样本中每一个都使用了不同的采集方法，可在相同的集合中选择多个采集方法。

采集方法也可用作模板。如果是这种情况，则每一个样本将使用相同的方法，但用户可以为每一个样本选择不同的质量或质量范围。**Batch Editor** 还可以用于导入在外部程序（如 **Microsoft Excel**）中创建的样本列表。

在提交样本进行处理之前，用户可以修改批次中的每一个细节。当提交一个批次进行分析时，用户可以提交整个批次、批次中的特定集合或者集合中的特定样本。

例如，若要分析十个样本，其中五个使用一种采集方法，其余五个使用另外一种采集方法，则创建一个含有两个集合的批次，所用的每种方法一个集合。

注释: 我们建议用户在提交批次之前检查所有批次参数，以确保支架、孔板和进样瓶位置与自动进样器上的硬件设置相匹配，并且支架设置选项 **Specify rack** 在采集方法中可用，并已为使用中的自动进样器选中。

注释: 我们建议用户确保在提交批次之前将具有正确样本位置的正确支架和孔板载入自动进样器。

表 4-1 Batch Editor 选项卡

选项卡	描述
Sample	用于创建样本列表，并选择样本详情，如样本名称以及采集样本所使用的采集方法。

表 4-1 Batch Editor 选项卡 (续)

选项卡	描述
Locations	用于选择自动进样器中的样本位置。样本位置可以在 <b>Sample</b> 选项卡中以数字方式指定。不过， <b>Locations</b> 选项卡可以提供图形化界面来选择样本位置。
Quantitation	用于选择定量批次的样本类型和浓度。因为定量信息可以在数据采集后在定量结果表中指定，用户不一定要使用 <b>Batch Editor</b> 中的 <b>Quantitation</b> 选项卡，而可以使用 <b>Quantitation Wizard</b> 。
Submit	用于验证样本信息，并将样本提交至采集队列。 <b>Queue Manager</b> 可显示队列、批次和样本状态，让用户能够管理队列中的样本。

## 导入批次文件

在 **Batch Editor** 中，用户可以导入包含批次信息的文本文件，但不能创建批次。如果所有样本详细信息都包含在电子表格中，则重新排列和导入电子表格中的数据比在 **Batch Editor** 中手动键入数据更快。

从文本文件导入批次信息前，确保该文件中数据的组织结构和格式正确无误。尤其要提到的是，电子表格中的列标题必须与 **Batch Editor** 列标题相匹配。为了确保文本文件包含合适的标题，使用 **Batch Editor** 创建一个批次，以文本文件导出，在电子表格编辑器中键入适当的数值，然后将文件导回 **Batch Editor**。

格式正确的文件范例，请参照 **Example** 项目中的 **Batch** 文件夹。

批次文件中的信息也可以导出并在其它应用中使用，如 **Microsoft Excel**、**Microsoft Access** 和某些实验室信息管理系统 (LIMS) 软件。

## 在批次编辑器中设置定量详情（可选）

如果对某一批次使用了一种定量方法，而且用户在采集后不想选择定量详情，那么必须在提交批次之前定义定量详情（样本类型、样本浓度）。

根据 **Sample** 选项卡中所选的定量方法，**Quantitation** 选项卡中会显示相应的 **Internal Standard** 和 **Standard** 列。

1. 在 **Batch Editor** 窗口中打开一个批次文件后，打开 **Quantitation** 选项卡。
2. 选择包含样本的集合。
3. 从单元格的列表中为所有样本选择 **Quant Type**、**Dilution Factor** 和 **Weight/Volume**。
4. （如果需要）在 **Analyte** 列中，键入分析物浓度。
5. （如果需要）在 **Internal Standard** 列中，键入内标浓度。
6. 对批次中的每个集合均重复此程序。

用户可以在表或图形中查看数据文件中所包含的信息。图形数据可以通过色谱图或质谱呈现。这两种形式的数据都可以通过数据点表格显示，并且可以对这些数据进行各种排序操作。

本软件在 **wiff** 文件中存储 **TIC** 和方法数据，并在 **wiff.scan** 文件中存储质谱数据。软件同时需要 **wiff** 和 **wiff.scan** 文件来打开数据文件。此外，软件还可以打开 **txt** 文件，这种文件只包含一个样本的数据。在软件中打开数据文件时，会出现不同的窗格，具体取决于所进行的实验类型。

如果选中 **Tune Method Editor** 中的 **MCA** 复选框，数据文件将会打开质谱。如果没有选中 **MCA** 复选框，则数据文件打开总离子色谱图 (**TIC**)。用户可以选择一个范围，然后在 **TIC** 窗格中双击一个特定的时间，以显示该范围的质谱。

## 色谱图

色谱图可以显示各个实验中相对于时间的某些数量变化。比如，当质谱仪的程序要求对某个质谱扫描集合重复若干次时。色谱图数据是连续的，即使数据强度为零也不例外。色谱图不是直接由质谱仪生成的，而是从质谱产生的。

在色谱图视图中，以每秒次数 (**cps**) 为单位的强度在 **Y** 轴上显示，而 **X** 轴代表时间。峰是自动标记的。

如果是 **LC/MS** 系统，色谱图经常会以时间函数的方式显示，特定扫描的时间被获取，从而可以从扫描数中得出。

色谱图提供了数据的总体情况，在使用 **LC** 色谱柱的情况下，色谱图通常以时间为准，但它的确提供有关色谱峰成份的信息。例如，某个色谱图可能看上去只有一个峰，但这个峰所代表的化合物可能不止一种，即代表了不同的质量。

如果给定样本中的色谱条件变化，色谱数据的时间和强度都可能发生变化。

## 质谱图

质谱是指直接从质谱仪获取的数据，通常代表的是以特定质荷比 (**m/z**) 值检测到的离子数。它以图形形式显示，**X** 轴显示 **m/z** 值，**Y** 轴显示强度 (**cps**)。

对于 **MRM** 质谱，强度与两种质量有关：前体离子质量 (**Q1**) 和产物离子质量 (**Q3**)。

当数据作为质谱查看时，可获得有关某化合物的质量特异性信息。质谱提供特定色谱峰的对应离子的 **m/z** 值。这些离子可用于查找更具体的信息。例如，质谱显示的是组成一个峰的所有质量，包括每一种质量的强度。

质谱强度可能会改变，但 **m/z** 值是固定的，因为化合物的质量不会改变。

生成质谱数据有两种方式：

- 如果只采集到一种扫描或者将 **MCA** 用于采集，则会以质谱方式显示数据。
- 来自色谱图。

# 背景减除

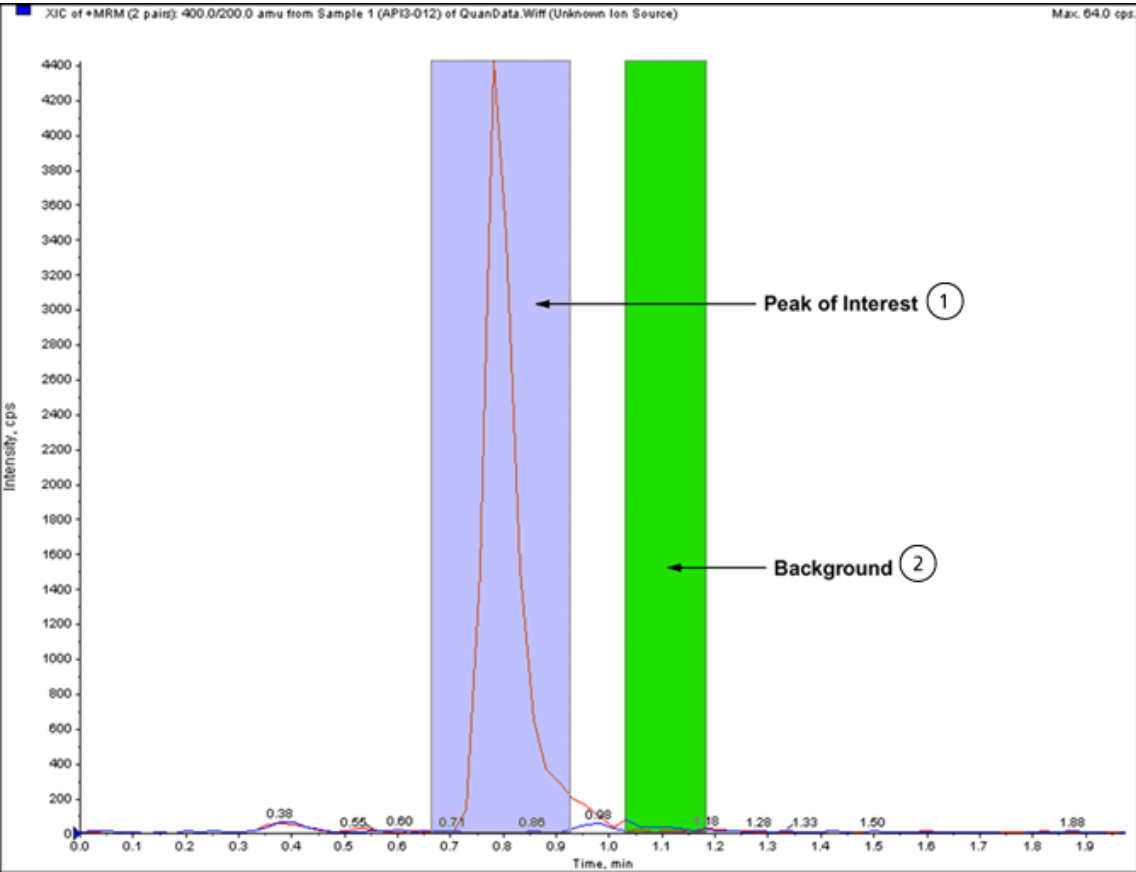
背景减除是通过从含有峰的范围减去一个或两个含有噪声的范围，从而减少质谱中的噪声数量。用户可以独立移动各个范围，或者将其锁定，并将其作为图形内的一个实体来移动，以优化色谱峰隔离，或者隔离另一个峰。 **Locked Background Subtract** 为预设设置。软件提供了几种不同的背景减除方法。

**Background Subtract:** 用户可以使用背景减除选项来隔离所关注的峰。用户可以突出显示和减除最多两个选定的峰范围。用户也可以锁定选定范围，并将其在图形内移动，以优化色谱峰隔离，或者隔离另一个峰。

## 执行色谱图的背景减除

- 1. 打开一个数据文件。
- 2. 在色谱图中选择一个背景范围。
- 3. 按住 **Shift** 键，然后选择另一个背景范围。

图 5-1 XIC



项目	描述
1	关注峰

项目	描述
2	背景

- 若要设置减除范围，可单击 **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**。
- 选择所关注的峰。
- 单击 **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**。  
此时峰的背景便被减除，并生成一个新的质谱。
- 若要隔离另一个峰，拖动色谱图内的锁定范围，然后重复上述背景减除操作。

提示! 若要清空背景减除范围，可单击 **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**。

- 若要经过背景减除的质谱作为经过处理的数据文件保存，可单击 **File > Save Processed Data File**。

## 解锁范围

前提条件
<ul style="list-style-type: none"><li>选定的减除范围被设置为已锁定。</li></ul>

单击 **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**。

此时选定范围便被解锁，每一个范围都可以独立移动。

## 基线减除

基线减除可以从一个数据集中删除一个常数，或者缓慢地改变偏置。此功能在寻找被噪声掩盖的小峰时很有用。软件在进行基线减除时使用以下算法。

- 数据集中的每一个数据点都被视为（质量或时间）窗口的中心，其宽度由用户定义，单位为 **amu** 或分钟。
- 窗口中位于当前数据点某一侧的最小值将被软件找到。
- 软件会在当前数据点的两个最小值和高度（强度）之间拟合出一条直线，拟合线位于计算所得线的上方。数据的终点被视为最小值。
- 数据点将被新的计算值代替。

## 计算器

计算器用于对所收集的数据执行计算。尽管计算器是一个独立窗口，但它是与软件中的活动图形相关联的。

可进行下列计算：

- [Elemental Composition 计算器](#)



- [Hypermass 计算器](#)
- [Elemental Targeting 计算器](#)
- [Mass Property 计算器](#)
- [Isotopic Distribution 计算器](#)

用户可以在计算器的不同窗口之间复制和粘贴文本框。来自任一计算器的数据均可以通过单击窗口左上角的 **Print** 图标来打印。有关使用计算器的更多信息，请参阅《帮助》。

Elemental Composition、Mass Property 和 Isotopic Distribution 计算器的数据可以导出到不同的文件。使用 Elemental Targeting 计算器修改活动图形中的数据。HyperMass 和 Isotopic Distribution 计算器的数据可以叠加到活动质谱中。

**提示!** 在 Appearance Options 对话框的 Calculators 选项卡中设置计算器数据的精度。要打开该对话框，单击 **Tools > Settings > Appearance Options**。

## Elemental Composition 计算器

Elemental Composition 计算器可以根据目标质荷比决定可能的分子或氨基酸组成。手动键入该比值，或从活动谱图中选择。该计算器可以创建一个构成关注质量的可能元素或氨基酸组成及各自特性的结果表。

键入或选择允差、电子状态和电荷数等参数。用户也可以键入一份可能元素的列表，并设置每一个元素的个数上限。

## Hypermass 计算器

Hypermass 计算器可根据不带电的质量决定多电荷离子的分布。用户可以选择不带电质量，包括加合物及其极性。

计算器会显示 Hypermass 系列的图形表示，并可以叠加到活动谱图上。它还提供了一份 Hypermass 数据列表。

## Elemental Targeting 计算器

Elemental Targeting 计算器可以根据特定的（主要是与同位素分布对应的）离子形式来减少数据质谱。它还可以搜索某个 MS 数据质谱的特定峰形式，并作为方程式或同位素分布输入。

如果计算器找到了匹配对象，就会创建一个经过精简的图形，其中仅包含属于特定形式的数据。对质谱来说，计算器会删除所有不匹配的数据。对色谱图来说，计算器会计算出每一个相应质谱的目标元素，并根据这些新质谱重新生成色谱图中的每一个数据点。

## Mass Property 计算器

Mass Property 计算器可确定各种属性，如精确质量、平均质量、质量准确度以及关注质量的质量缺陷等。该计算器生成的结果取决于已完成的输入字段的数量。

## Isotopic Distribution 计算器

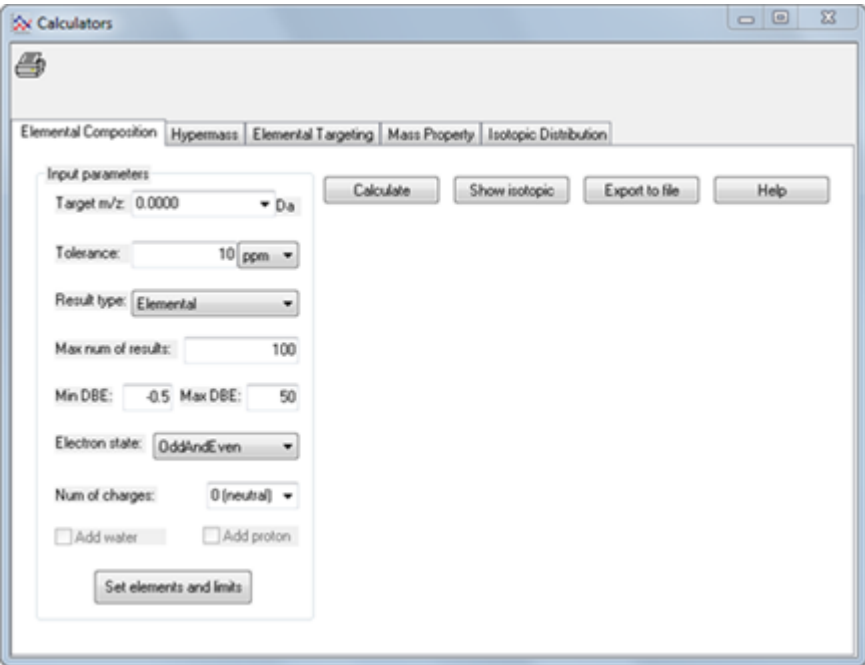
Isotopic Distribution 计算器可以根据输入的方程式确定同位素分布。这样用户就可以根据同位素的相对强度，区分相同质量的不同化合物。

计算得出的同位素分布可以通过图形或文本格式在 **Isotopic Distribution** 窗格中显示、叠加到活动质谱或者导出到一个独立文件。

## 访问计算器

单击 **Tools > Calculators**。

图 5-2 **Calculators** 对话框



**Calculators** 对话框打开。

## 棒状图峰

计算峰的棒状图会将峰分布值转变成一个  $m/z$  值以及代表峰的强度。在轮廓图模式下采集的棒状图数据可以将数据简化，并减小文件的字节数。棒状图数据可以提供更为准确的峰分布，并减少数据量，但也会删除峰形状方面的信息。

棒状图算法通过运用加权平均强度，将峰转换成单个数值，以计算峰的棒状图。该算法会输出一个带参数的峰列表，如下表中所示。

表 5-1 峰参数

参数	定义
Centroid Value	棒状图数据的值，以质量或时间为单位。
Intensity	每一个峰的强度，单位为 cps。
Width	棒状图峰的宽度，单位为 Da。

向数据库中添加数据或者在进行搜索时，数据会自动计算为棒状图。

## 计算峰质心

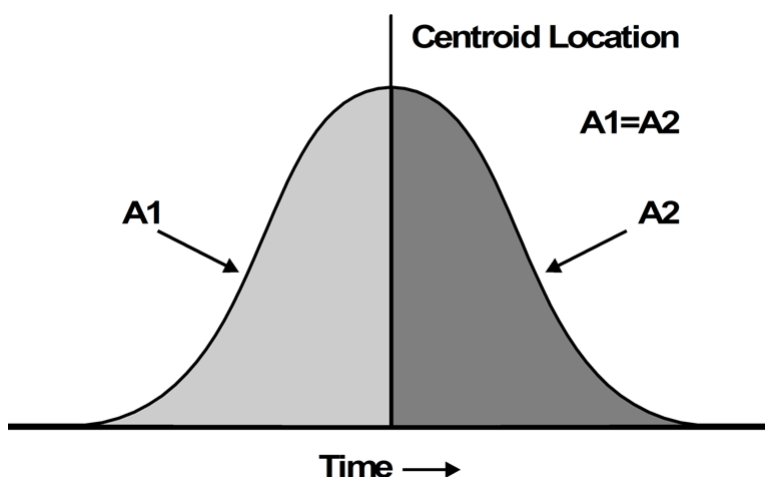
1. 选择一个含有谱图的窗格。

计算峰质心会改变现有图形的外观。若要将结果与原始数据进行比较，可以在计算峰质心前将图形复制一份。

2. 单击 **Explore > Centroid**。

软件将对数据进行棒状图处理。

图 5-3 分析物质心位置



## 数据分析

用户可以打开包含现有数据或当前正在采集数据的文件。也可以通过表格形式查看所有与实验相关的数据。表格窗格包含两个选项卡：**Data List** 选项卡和 **Peak List** 选项卡。**Data List** 选项卡包含实验相关信息，如采集时间和扫描强度。**Peak List** 选项卡中包含了与峰有关的信息，如峰高度、峰面积和基线类型。

## 总离子色谱图

总离子色谱图 (TIC) 通过将一系列质量扫描中所有离子的强度贡献值进行求和而创建。用户可以用 TIC 在单一窗格内查看全部数据集合。它是由一次扫描当中所有离子的强度之和组成的，并对照时间绘制成色谱图，在色谱图窗格中显示。如果数据中包含来自多个实验的结果，则用户可以为每一个实验单独创建一个 TIC，用另一个 TIC 代表所有实验汇总结果。代表所有实验汇总的预设 TIC 的 X 轴正下方会显示一个分离工具。

## 提取离子色谱图

提取离子色谱图 (XIC) 通过在单个离散质量值处取强度值或者从一系列质谱扫描中的某个质量范围内取强度值而获得。它可以显示特定的质量或质量范围作为时间函数的行为。离子强度或特定范围内的所有离子强度之和被绘制成色谱图，并在色谱图窗格中显示。

## 基峰色谱图

基峰色谱图 (BPC) 显示的是每一次扫描中的最大强度离子的强度，以扫描次数或保留时间的函数形式显示。在 TIC 中噪声占主导、因而存在较大偏差且色谱峰难以区分的情况下，这种方法较为适用。它还有助于区分共洗脱成份。BPC 只能从单个时段、单个实验数据生成。

图中使用两种颜色，每当出现基峰质量变化时便交替显示。当通过翻页或缩放来操控数据时，颜色变化维持原状。有关选择图中所用颜色方面的信息，请参阅《帮助》。

## 提取波长色谱图

提取波长色谱图 (XWC) 是通过取单个波长处的强度值或通过求一系列波长的吸光度之和而获得的波长色谱图。

## 二极管阵列检测器

用户可以查看单个时点的二极管阵列检测器 (DAD) 质谱，或者某个时间范围的总波长色谱图。

## 总波长色谱图

总波长色谱图 (TWC) 是一种不常使用的色谱图。它将总吸光度 (mAU) 作为时间的函数来显示。TWC 提供了一种在单一窗格内查看全部数据集的方式。它包括在色谱窗格中对时间绘图的一次扫描内所有离子吸光度的综合情况。如果数据中包含来自多个实验的结果，则用户可以为每一个实验单独创建一个 TWC，用另一个 TWC 代表所有实验汇总结果。

## 叠加图形

通过叠加用类似方法创建的图形，可以目测比较两个或多个数据集合。每个质谱都可以按轨迹线的颜色加以区分。对于全扫描数据而言，用户可以用这种方式观察若干样本质谱之间的差别。

如果选择了一个或多个窗格，则每个 XIC 都在单独的窗格中打开。

---

**提示!** 如果在同一窗格内叠加的图形少于四个，按住 **Ctrl** 并在窗格内单击右键，然后单击 **Appearance Options**。在 **Appearance Options** 对话框中的 **Multiple Graph Options** 选项卡上，为 **Spectrum** 和 **Chromatogram** 的 **Overlay Multiple Panes** 字段选择 **Yes**。

---

1. 选择要叠加的第一个窗格。
2. 单击 **Explore > Overlay**。
3. 单击第二个窗格。

图形将进行叠加，并用不同的颜色显示两条轨迹。

---

**提示!** 若要查看叠加图形的颜色代码列表，在窗格的标题栏上单击右键。

---

## 在叠加图形之间循环

1. 选择一个包含叠加图形的窗格。
2. 单击 **Explore > Cycle Overlays**。

---

此时视图会发生改变，序列中的下一个图形将在前台显示。

## 叠加求和

如果将两个或以上的图形叠加，用户可以将图形汇总，以获得一条新轨迹。新轨迹上的每个点都是各个图形上的点之和。对类似数据类型的若干叠加图求和可以让后面的处理操作变得更简单和更迅速。例如，用户可以将若干个 **XIC** 叠加，对其求和，然后对汇总后的叠加图进行平滑，以消除噪声。

对叠加图求和类似于生成一个总离子色谱图，其优点是能够选择用哪些图来叠加。例如，如果要查看 10 个实验的结果，则 **TIC** 将全部 10 个实验的数据加在一起。如果对叠加图求和，用户可以选择只添加 10 个叠加图中的 9 个。如果有 1 个实验中采集的数据都是噪声，可使用此程序。

1. 叠加要求和的图形。
2. 单击 **Explore > Sum Overlays**。  
图形便会叠加在一起。

## 自定义图形

图形可使用图形和色谱图上预设的标签、图注或文本样式进行自定义。用户可以选择用于标记峰和轴的字体，以及轨迹线的颜色。用户还可以添加轴线标记和标记类型，以及峰的精度。

### 向图形添加图注

图注可用于标记关注的峰或图形上的重要点。如果将图注置于峰旁边，当您对图形进行缩放时，图注就始终伴随着峰。当用户在数据文件中的样本之间移动时，图注也始终伴随着原始样本。图注为一行，最多可含 128 个字符。

1. 在质谱上单击右键，然后单击 **Add Caption**。  
此时会打开 **Add Caption** 对话框。
2. 在 **Caption** 框中键入文本内容。
3. 若要更改图注的大小和样式，单击 **Font**。
4. 若要放置图注，单击 **OK**。

---

**提示!** 如果对图注的位置不满意，则拖动图注至其他位置。当对图形进行缩放时，图注与 **X** 和 **Y** 轴的相对位置保持不变。若要编辑或删除图注，用右键单击图注，然后单击相应的命令。

---

### 向图形添加文本

使用文本可向图形中添加多行信息。图注与特定的峰相关联，在图形缩放时会随之移动，而文本标记与之不同，在图形缩放时仍位于原来位置。当用户在数据文件中的样本之间移动时，文本不伴随原始样本。

1. 在图形上单击右键，然后单击 **Add User Text**。  
此时会出现一个 **Add User Text** 对话框。
2. 在 **User Text** 字段中键入文本内容。

- 3. 若要使文本居中，选择 **Center Text** 复选框。
- 4. 若要更改文本的大小和样式，单击 **Font**。
- 5. 若要插入文本，单击 **OK**。

提示! 如果对文本的位置不满意，则拖动文本至其他位置。若要编辑或删除文本，用右键单击文本，然后单击相应的命令。

## 化合物数据库

化合物数据库用于存储化合物的有关信息，包括优化规范。当有大量样本和大量化合物必须快速优化时，可以使用化合物数据库。**Compound Database** 窗口用于保存经过优化的化合物条件，用户可以获取这些条件来运行样本。更多信息，请参阅文档：《帮助》。

## 等值线图

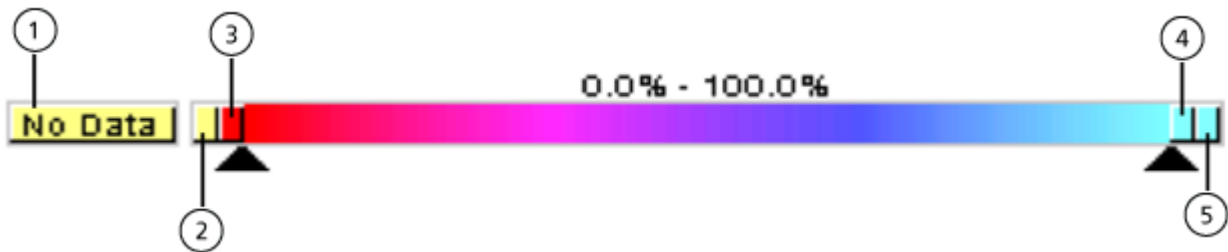
等值线图是一种有颜色代码的完整数据集合图，它在图中用颜色来表示第三维度。在总离子色谱图 (TIC) 的等值线图中，X-轴表示保留时间或扫描次数，Y-轴表示质量，颜色表示该点的数据强度。在二极管阵列 (DAD) 数据的总波长色谱图 (TWC) 的等值线图中，X-轴表示保留时间或扫描次数，Y-轴表示波长，颜色表示吸光度。等值线图是一种用于数据采集后的工具，在实时扫描采集中不起作用。

注释: 等值线图不支持 MI 或 MRM 扫描，但支持 DAD 扫描。

颜色是等值线图的第三根轴，代表强度或者吸光度。用户可以用等值线图上方颜色条上的控制三角来更改等值线图内的高低强度或吸光度值。等值线图窗格上方的百分比参数表示高、低滑块位置的值。实际值要以选定区域内最大强度或吸光度的百分比为依据。该值在等值线图窗格的右上角显示。

下图中所示的控件可以改变等值线图的颜色。

图 5-4 等值线图颜色控制按钮



项目	描述
1	无数据
2	低限以下数据
3	低数据
4	高数据

项目	描述
5	高限以上数据

用户可以定义等值线图上的颜色，以便根据他们的需要更好地比对和显示数据。例如，设置强度/波长并更改 **Below Low Data** 和 **Above High Data** 的颜色可以消除等值线图上的背景噪声。

移动滑块控件时，**Below Low Data** 和 **Above High Data** 按钮可以缩小和放大颜色条。更改等值线图颜色时，新颜色将成为所有后续图形的预设颜色。

表 5-2 等值线图窗格的右键菜单

命令	功能
<b>Show DAD Spectrum</b>	（显示 DAD 质谱）打开包含 DAD 质谱的新窗格。
<b>Extract Wavelengths (Use Range)</b>	（提取波长（使用范围））从 DAD 质谱中提取最多三个波长范围，用于显示提取波长色谱图。
<b>Extract Wavelengths (Use Maximum)</b>	（提取波长（使用最大值））使用最大波长提取波长范围。
<b>Zoom to selection</b>	（缩放到选择）在所选区域上放大。
<b>Add User Text</b>	（添加用户文本）在光标位置添加一个文本框。
<b>Undo Zoom</b>	（撤消缩放）使图形恢复原始尺寸。
<b>Delete Pane</b>	（删除窗格）删除选定窗格。
<b>Show Cross-Hair</b>	（显示十字线）显示十字线 (nm/min)。

## 查看等值线图

等值线图仅可在采集后查看。用户可以从 TIC、XIC、TWC 或 XWC 图形中查看等值线图。TIC 和 XIC 适用于所有 wiff 数据文件。TWC 和 XWC 仅适用于通过 DAD 或 PDA 采集的数据。

1. 在 Explore 模式下，将数据文件以 TIC、XIC、TWC 或 XWC 图形方式打开。
2. 突出显示要在等值线图中查看的范围。如果未进行选择，则将查看整个范围。
3. 单击 **Explore > Show > Show Contour Plot**。  
选定区域的等值线图便会在一个单独的窗格中打开。

提示! 要关闭 Contour Plot 窗格，右键单击 Contour Plot 窗格，然后单击 **Delete Pane**。

## 在等值线图中选择一个区域

若要放大某个特定的选择区域，或者查看该选择区域所对应的质谱，请执行以下操作之一：

- 若要选择一个框内的标准区域，可在等值线图上的某个区域周围用鼠标画一个方框。
- 若要在垂直方向选择，可按住 **Ctrl**，然后沿垂直方向拖动鼠标。
- 若要在水平方向选择，可按住空格键，然后沿水平方向拖动鼠标。

## 在等值线图中设置强度和吸光度

执行以下任一操作：

- 若要在等值线图中设置强度/吸光度低限值，从等值线图上的颜色条中，将左侧的三角形滑块拖至所需位置。

等值线图会自动调节低于该设置的数值的颜色，以指示这些数值在范围以外。

- 若要在等值线图中设置强度/吸光度高限值，从等值线图上的颜色条中，将右侧的三角形滑块拖至所需位置。

等值线图会自动调节高于该设置的数值的颜色，以指示这些数值在范围以外。

## 更改等值线图的颜色

---

**提示!** 使用 **Define Custom Colors** 调色板，用户可以创建在等值线图中使用的自定义颜色。

---

1. 在 **Contour Plot** 窗格中，单击其中一个颜色按钮。  
此时会出现 **Color** 对话框。

---

**注释:** **Contour Plot** 中有五个按钮可用于控制颜色。当光标停留在按钮上时，它们会显示各自的名称。这样可确保更改正确的功能。此外，如果用户移动滑块控件，**Below Low Data** 和 **Above High Data** 按钮可以缩小和放大颜色条。在用户更改了等值线图颜色后，它立即成为所有后续图形的默认颜色。

---

2. 单击一种颜色。
3. 单击 **OK**。  
此时图形会随颜色的改变而发生变化。

## Dynamic Background Subtraction 算法

**Dynamic Background Subtraction** 算法可以增强信息相关采集 (IDA) 实验中前体离子的检测效果。当算法被激活后，IDA 将使用一个已经经过背景减除的质谱来选择所关注的前体离子进行 **MS/MS** 分析，而非直接从测量质谱中选择前体离子。由于在 **LC** 分析期间进行处理，该算法在信号强度增加时启用粒子种类检测。因此，此算法关注 **LC** 峰上升部分直至或稍微超出 **LC** 峰顶部的前体离子的检测和分析。

## 碎片解读

**Fragment Interpretation** 工具能够帮助用户解读 **MS/MS** 数据。**Fragment Interpretation** 工具可以从一个分子结构的非环单键裂解生成理论碎片质量列表。可以在第三方绘图程序中创建一



个分子结构，然后将其保存为 **mol** 文件。然后，它可以将理论列表与当前质谱中的峰进行匹配。**Fragment Interpretation** 可以用碎片列表显示理论碎片，并将碎片质量与质谱中的峰进行比较。超过阈值强度并在用户定义的碎片质量允差（最大 **2 Da**）范围内的峰被认为是匹配的，并以黑体字在碎片列表中显示。

注释: **Fragment Interpretation** 工具不能用于以下扫描类型:

- 前体离子
- 中性丢失
- **Q1** 多离子
- **Q3** 多离子
- 多反应监测 (**MRM**)

## 关联 **Fragment Interpretation** 工具与质谱

当在分子结构中选择了一个非环单键后，**Fragment Interpretation** 工具就会突出显示键裂解时所形成的两个碎片，并在关联的质谱中显示与之匹配的峰。

如果正在查看多个质谱窗格，**Fragment Interpretation** 工具会与当前活动的质谱关联。如果数据文件所包含的样本不止一个，**Fragment Interpretation** 工具会与当前活动的质谱关联。

如果在 **Fragment Interpretation** 工具打开时打开一个质谱，则活动的面板会自动链接至打开的质谱。

1. 单击 **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**。

2. 在 **Fragment Interpretation** 窗格的右下角单击 **connect** 按钮。  
此时鼠标会切换至关联工具。

3. 单击要与 **Fragment Interpretation** 工具相关联的质谱图。

左下角的关联图形指示图标中含有与碎片解读窗格关联的图形名称。如果图形或碎片解读窗格中有一个被关闭，关联便会中断。如果关联的 **wiff** 文件中含有不止一个样本，在用户翻页查看样本时，碎片解读窗格会自动更新。

## 将碎片与峰匹配

1. 单击 **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**。

2. 在 **Fragment Interpretation** 窗格中有 **.mol** 文件打开的情况下，在 **Fragment List** 中选择一个以黑体显示的单元格。  
在质谱中，软件会用 **Options** 选项卡中所选择的颜色突出显示匹配的谱峰。在分子结构中，键被突出显示。

3. 如果单击的某一行中包含的匹配碎片不止一个，软件就会在质谱中以 **Options** 选项卡中所选择的颜色突出显示最接近单同位素质量的谱峰。

## 在分子结构中选择一个键

1. 单击 **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**。

2. 在 **Fragment Interpretation** 窗格中有 mol 文件打开的情况下，单击分子结构中的一个非环单键。

此时所产生的两个碎片就会在 **Fragment List** 中突出显示。两个碎片的质量显示在键的某一侧。

如果有质谱与之关联，**Fragment Interpretation** 工具就会在图形中显示匹配的峰。如果选择了列表中的碎片，且该碎片与某个峰匹配，**Fragment Interpretation** 窗口就会放大该峰。

## 查看同位素

**Fragment Interpretation** 工具可以显示与碎片列表中的碎片相匹配的谱峰的理论同位素分布。

1. 单击 **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**。
2. 在 **Fragment Interpretation** 窗格中，单击 **Options** 选项卡。
3. 单击 **Show Isotopes** 复选框。
4. 单击 **Apply**。
5. 在碎片列表中选择与谱峰匹配的碎片。  
匹配谱峰的同位素分布在质谱中显示。

## 在质谱中显示方程式差异

两种相关假定碎片之间方程式和单同位素质量的差异可以显示出来。当选择两个峰时，会显示方程式差异。当选择了两个碎片或两个非环单键时，就会显示方程式和单同位素质量的差异。

1. 单击某个碎片峰。
2. 按住 **Shift** 键，然后选择另一个碎片峰。  
如果方程式差异与碎片列表中的某个碎片相等，则该碎片在列表中会突出显示。否则，与峰匹配的碎片之间的方程式差异就会在消息框中显示。

## 在碎片列表中显示方程式差异

1. 单击某个碎片的行号。
2. 按住 **Ctrl** 键，然后单击另一个碎片。  
如果碎片有相关性，则方程式和单同位素质量差异就会在消息框中显示。

## 在分子结构中显示方程式差异

1. 单击一个非环单键。此时软件会选择（两个突出显示碎片中的）预设碎片。若要选择裂解键的另一个碎片，请按住 **Ctrl**，然后单击化学键。
2. 选择一个第二非环键。若要选择预设碎片，按住 **Shift** 然后单击化学键。若要选择裂解键的另一个碎片，按住 **Ctrl + Shift**，然后单击化学键。  
**Fragment Interpretation** 工具会计算步骤 1 和步骤 2 中所选碎片之间的方程式和单同位素质量差异，前提是这些碎片之间具有相关性。方程式和单同位素质量差异在消息框中显示。

# IDA Explorer

信息相关采集 (IDA) Explorer 用于显示通过 IDA 方法所采集的数据。

在 **Appearance Options** 对话框的 **IDA Explorer** 选项卡中可以关闭和开启 IDA Explorer。在该选项卡中还可以定义 **List View** 中的列。

下图中的查看器左侧显示的是已进行产物离子扫描的质量。在此区域中，用户可以在列表视图或树状视图中检查对其执行了产物离子扫描的离子的质量、强度、时间和碰撞能量。在列表视图中，双击任何列的题头可以对列表进行排序。使用 **Appearance Options** 对话框可自定义列表视图中所显示的列。

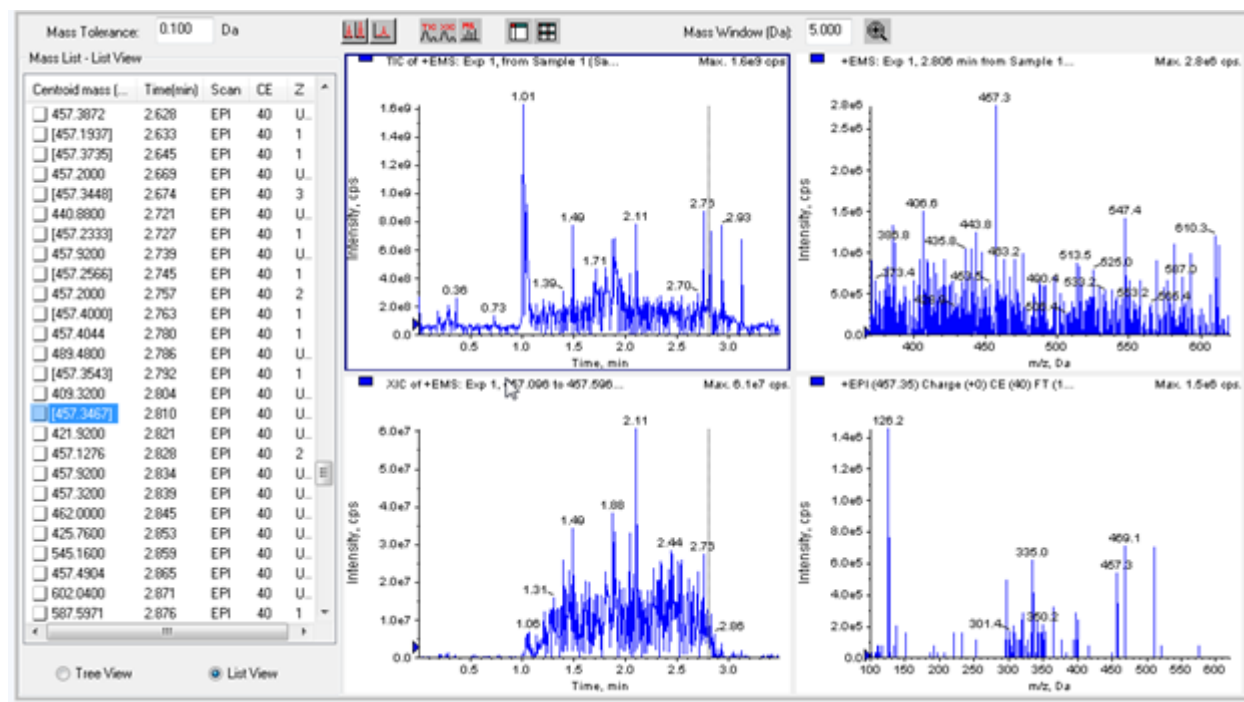
右侧的查看器被分成四个窗格。左上窗格显示测量 **TIC** 数据。左下窗格显示质量的 **XIC**。右上窗格显示全谱扫描或交替显示全谱扫描与增强型分辨率 (**ER**) 扫描，右下角窗格显示产物扫描。

IDA 查看器列出所有进行了增强型产物离子 (**EPI**) 扫描或 **ER** 扫描的质量。在 IDA 查看器中，用户可以执行以下操作：

- 在列表或树状视图中单击某个质量，以显示该质量的相关图表。
- 查看找到质量的测量质谱以及该质量的产物质谱。
- 显示全谱扫描的 **TIC** 以及每一个质量的 **XIC** 色谱图。

**注释：**带括号的质量表示该质量是合并的。合并质量是多个循环相邻的。显示合并质量时，表示这是一份经过平均的质谱，包含了所有相邻质谱的平均值。

图 5-5 IDA 查看器



## 谱库数据库

**Library Search** 功能可以将未知质谱与谱库数据库内的已知 **MS** 质谱进行比较，并生成一份可能的匹配项列表。**Library Search** 可用于创建和管理质谱数据库，通过该数据库可根据保存在数据库中的质谱，搜索和匹配未知质谱。

用户可以运用 **Library Search** 功能来：

- 对照谱库内容比较未知质谱。
- 向谱库添加纪录。
- 编辑现有纪录。

谱库数据可存储在以下位置：

- 本地数据库的 **MS Access**。
- **MS SQL Server**。

在使用 **Library Search** 功能之前，确定谱库数据库的保存位置，并将计算机连接至该位置。谱库数据库可以存储在本地计算机上，或者通过网络存储于服务器上。

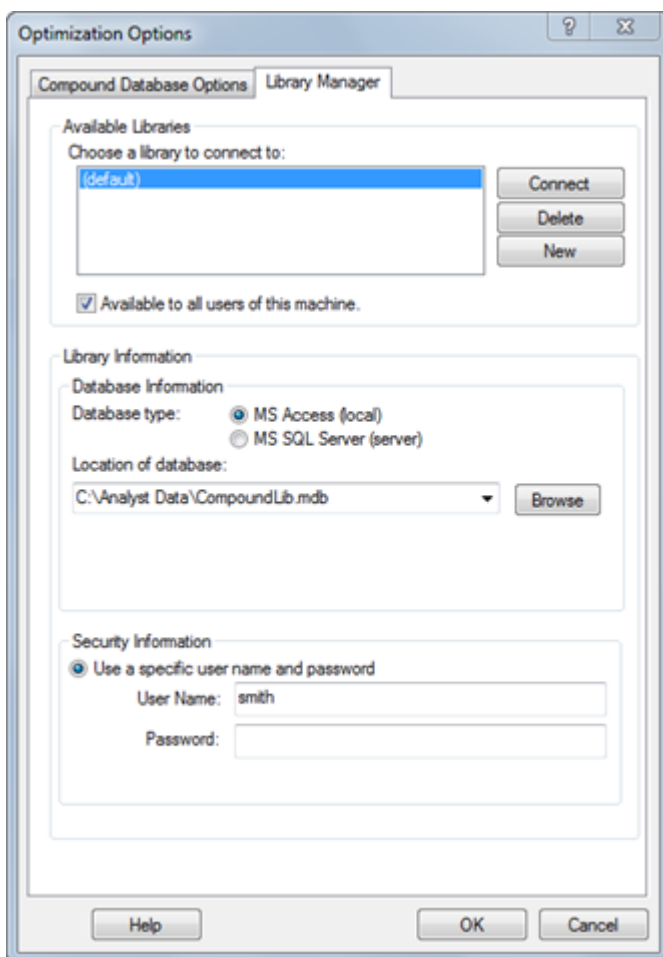
使用别名连接至数据库。此时，别名特指一个与特定数据库的连接，可以包括访问数据库所需要的用户名和密码。例如，用户的计算机上可能有一个已确定化合物的小型谱库数据库，而用户的组织单位可能有一个用户偶尔会使用的中央数据库。为每一个数据库创建别名允许用户在数据库之间迅速切换。有关创建假名和连接数据库的详情，请参阅《帮助》。

## 在现有谱库数据库之间切换

用户可以连接任何已设置别名的数据库。

1. 单击 **Tools > Settings > Optimization Options**。  
此时会出现 **Optimization Options** 对话框。
2. 单击 **Library Manager** 选项卡。

图 5-6 Optimization Options 对话框—Library Manager 选项卡

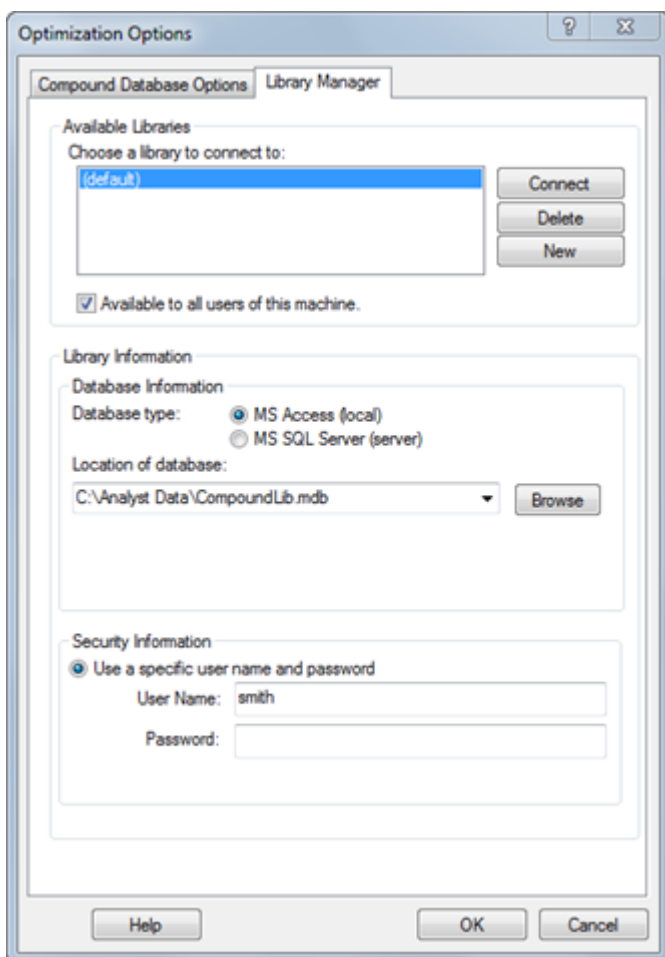


3. 在 **Available Libraries** 部分单击要连接至的数据库的别名，然后单击 **Connect**。
4. （可选）若要允许其他用户访问数据库，可勾选 **Available to all users of this machine** 复选框。
5. 单击 **OK**。

## 创建本地谱库数据库

1. 单击 **Tools > Settings > Optimization Options**。  
此时会出现 Optimization Options 对话框。
2. 单击 **Library Manager** 选项卡。

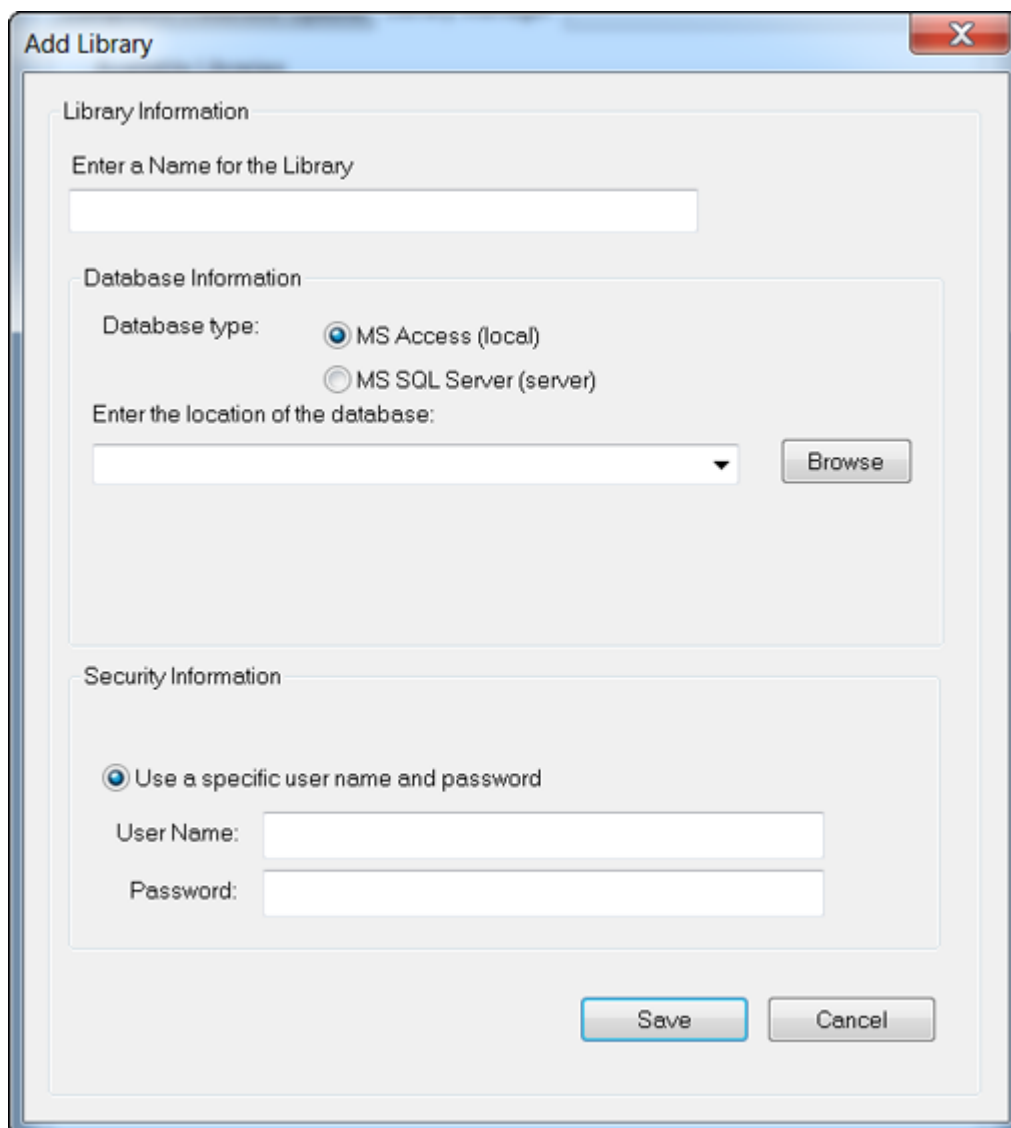
图 5-7 Optimization Options 对话框—Library Manager 选项卡



3. 在 **Available Libraries** 部分，单击 **New**。

此时会打开 Add Library 对话框。

图 5-8 Add Library 对话框

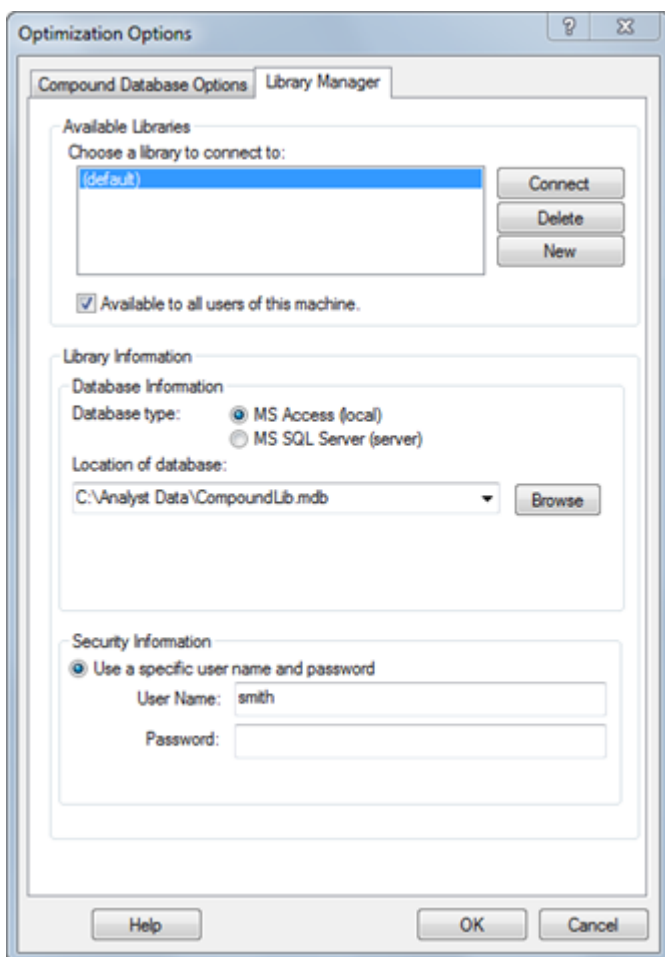
The image shows a Windows-style dialog box titled "Add Library". It has a standard title bar with a close button (X). The dialog is divided into three main sections: "Library Information", "Database Information", and "Security Information".  
1. "Library Information" section: Contains a text input field with the label "Enter a Name for the Library".  
2. "Database Information" section: Contains two radio buttons for "Database type": "MS Access (local)" (which is selected) and "MS SQL Server (server)". Below these is a text input field labeled "Enter the location of the database:" and a "Browse" button to its right.  
3. "Security Information" section: Contains a radio button labeled "Use a specific user name and password" (which is selected). Below this are two text input fields: "User Name:" and "Password:". At the bottom right of the dialog are "Save" and "Cancel" buttons.

4. 在 **Enter a Name for the Library** 字段中，键入谱库的名称。
5. 在 **Database Information** 部分中，选择 **MS Access (local)**。
6. 键入数据库位置。
7. 如果需要，在 **Security Information** 部分键入用户名和密码以访问数据库。
8. 单击 **Save**。

## 连接服务器谱库数据库

1. 单击 **Tools > Settings > Optimization Options**。  
此时会出现 Optimization Options 对话框。
2. 单击 **Library Manager** 选项卡。

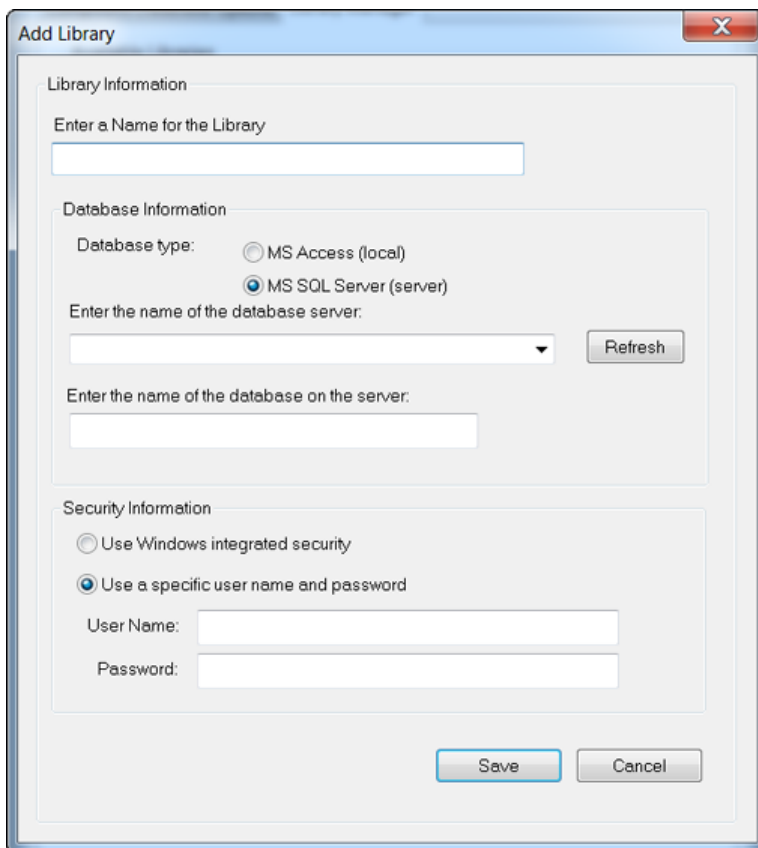
图 5-9 Optimization Options 对话框—Library Manager 选项卡



3. 在 **Available Libraries** 部分，单击 **New**。  
此时会打开 Add Library 对话框。
4. 在 **Enter a Name for the Library** 字段中，键入谱库的名称。
5. 在 **Database Information** 部分选择 **MS SQL Server (server)**。



图 5-10 Add Library 对话框

The image shows a Windows-style dialog box titled "Add Library". It is divided into three main sections: "Library Information", "Database Information", and "Security Information".  
1. "Library Information": Contains a text input field with the label "Enter a Name for the Library".  
2. "Database Information": Contains two radio buttons for "Database type": "MS Access (local)" and "MS SQL Server (server)". The "MS SQL Server (server)" option is selected. Below these are two text input fields: "Enter the name of the database server:" (with a dropdown arrow) and "Enter the name of the database on the server:". A "Refresh" button is located to the right of the first input field.  
3. "Security Information": Contains two radio buttons: "Use Windows integrated security" and "Use a specific user name and password". The "Use a specific user name and password" option is selected. Below these are two text input fields labeled "User Name:" and "Password:". At the bottom of the dialog are "Save" and "Cancel" buttons.

6. 键入数据库服务器的名称。
7. 键入数据库的名称。
8. 执行以下操作之一：
  - 如果需要特定的用户名和密码才能访问该数据库，则请键入用户名和密码。
  - 如果使用了 Windows 安全功能，则在 Security Information 部分选择 **Use Windows integrated security** 选项。
9. 单击 **Save**。

## 查看全部谱库记录

单击 **Explore > Library Search > List**。

此时会出现 Librarian 对话框，并列出数据库中的所有记录。

## 向谱库添加纪录

1. 右键单击一个处于活动状态的质谱，然后单击 **Add a Record**。  
该质谱将自动计算为棒状图。此时会出现 Add a Record 对话框，对话框内有来自该质谱的数据。
2. 在 Mass Spectral Information 选项卡的 **Compound Name** 字段内键入一个名称。

化合物名称是强制性的，必须是谱库内化合物的唯一标识。

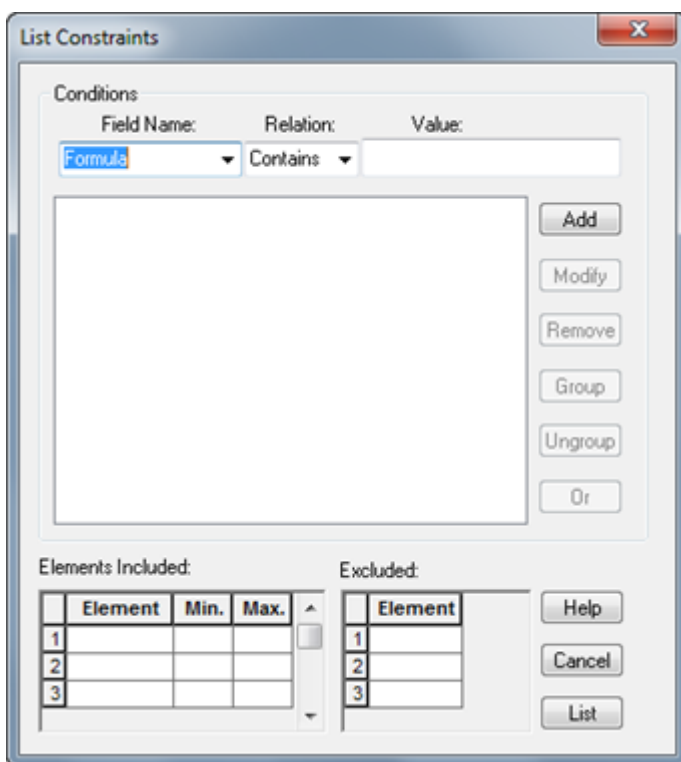
3. 编辑其他字段。很多字段都是用质谱关联数据自动填入的。
4. 单击 **General Information** 选项卡。
5. 按需要编辑字段。
6. 单击 **OK**。

## 用限制条件搜索谱库记录

使用 **List with Constraints** 可缩小结果。定义后，限制条件即会用于所有搜索。

1. 单击 **Explore > Library Search > List With Constraints**。

图 5-11 **List Constraints** 对话框



**List Constraints** 对话框随即打开。

2. 在 **Field Name** 列表中，选择一个限制条件所依据的字段。
3. 在 **Relation** 列表中，选择应用到字段名称的关系（操作人员）。
4. 在 **Value** 字段中，键入基于所选关系的字段名称的值。
5. 若要将选定的限制条件添加到 **Conditions** 列表，单击 **Add**。
6. 根据需继续向条件列表中添加限制条件。
7. 将各种独立的限制条件结合在 **Conditions** 列表中可以创建特定的条件，以便提高搜索效率。若要将限制条件进行组合，先选择好限制条件，然后单击 **Group**。若要将组合的限制条件分开，单击该组，然后单击 **Ungroup**。

8. 若要改变限制条件之间的关系，单击关系，然后单击 **And** 或 **Or**。
9. 若要包括含有一定数量的特定元素原子的化合物，可在 **Elements Included** 表中选择或键入元素，然后键入元素原子数的最小值和最大值。

注释：元素符号区分大小写。例如，氢的符号是 **H** 而不是 **h**，钠的符号是 **Na** 而不是 **NA** 或 **na**。

10. 若要排除含有某些元素的化合物，需在 **Excluded** 表中选择或键入元素。
11. 若要搜索符合设定条件的化合物，单击 **List**。  
符合所有限制条件的记录在 **Records** 表中显示。列出的限制条件会被系统保存。

## 谱库搜索提示

目的	方法
组合条件	选择组合条件，然后单击 <b>Group</b> 。该功能的作用类似于方程式中的括号。
不使用限制条件搜索	右键单击一个处于活动状态的质谱，然后单击 <b>Search Library</b> 。 此时会出现 <b>Search Results</b> 对话框。

## 搜索相似质谱

用户可以针对某个与活动质谱匹配（或类似）的质谱及其相关化合物信息来搜索谱库。搜索可以附带或不附带限制条件。附带限制条件搜索时，只有符合所有标准的记录才会列出。结果以排序列表的方式显示。列表中的第一项是与活动质谱符合程度最高的项。列表中排名较低的条目符合度较差。

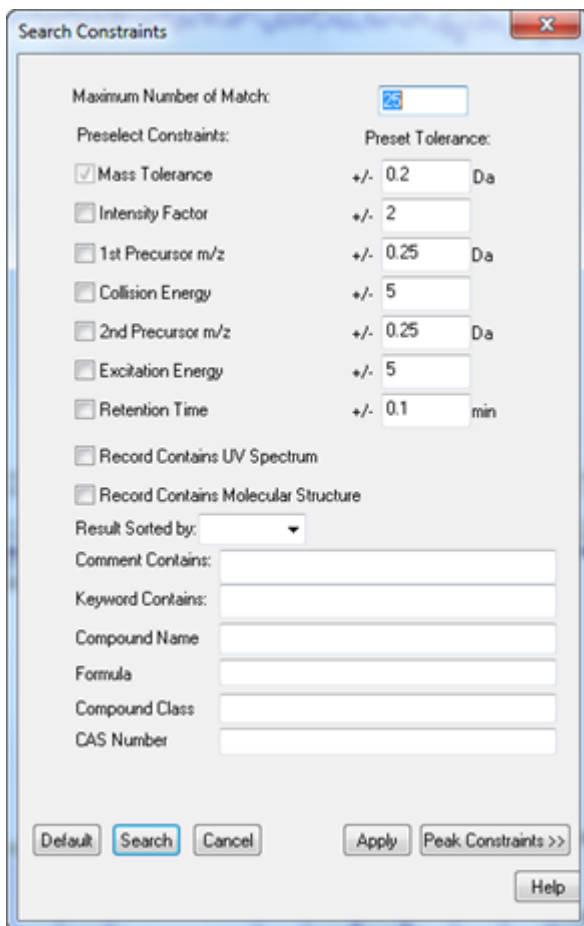
选择的限制条件越多，列表就越精确，列出的项就越少，且相关程度越高。在定义一组限制条件后，除非对它们进行编辑，否则它们将应用到所有后续搜索。在不附带限制条件进行搜索的情况下，建议质谱列表就要大得多，因为谱库对质谱数据的特定匹配较少。

只有高于阈值的峰才会在搜索中被用到。选好搜索限制条件后，用户还可以向活动质谱添加或从中删除峰。

例如，如果用户认为某个峰实际上是背景或噪声尖峰，则不应用它进行搜索，因为这会使结果不准确。

1. 右键单击一个处于激活状态的质谱，然后单击 **Search With Constraints**。  
软件会自动计算质谱的质心。
2. 在 **Maximum Number of Match** 字段中，键入希望搜索返回的最大化合物数量。

图 5-12 Search Constraints 对话框



3. 在 **Preselect Constraints** 部分，选择将应用的限制条件的复选框。
4. 对选择的每一项限制条件，在 **Preset Tolerance** 部分键入允差。
5. 如有必要，从 **Result Sorted by** 列表中选择一种记录排列方法。
6. 如有必要，可在 **Comment Contains** 字段中键入说明文本。
7. 如有必要，可在 **Keyword Contains** 字段中键入说明文本。
8. 若要通过添加和删除峰的方式来应用峰限制条件，可单击 **Peak Constraints**。此时 **Peaks Included** 表便会打开。
9. 要将峰添加到搜索列表中，单击 **Add**，然后在空单元格内键入 *m/z* 值以及相应的强度。
10. 若要将峰删除使之不在搜索范围内，选中这些峰，然后单击 **Remove**。
11. 单击 **Search** 保存限制条件，并开始搜索。

## 从搜索结果中查看化合物

如果有多个质谱与未知质谱匹配，用户可能希望查看已知质谱，并与未知质谱进行比较。

1. 在 **Search Results** 对话框的化合物列表中，选择化合物的行号。

2. 单击某个已知化合物的质谱窗格。  
此时会显示所选化合物的质谱。

## 已处理数据文件

用户可以保存经过处理的数据，如图形排布和图注，保存后只能在 **Explore** 模式下重新打开。这些文件还包含了历史信息，与数据文件较为相似，不同的是它们仅包含 **Explore** 模式下的活动窗格内的数据。这些文件具有 **pdt** 扩展名，并保存在当前项目的 **Data** 文件夹项下。

## 保存经过处理的数据文件

1. 选择要保存的数据窗格。
2. 单击 **File > Save Processed Data File**。
3. 在 **File name** 字段中键入一个名称。
4. 单击 **Save**。

## 打开经过处理的数据文件

1. 在 **Explore** 模式下，单击 **File > Open Processed Data File**。  
此时会打开 **Load Processed Data File** 对话框。
2. 选择一个文件，然后单击 **Open**。

## 定性数据

用户可以在表或图形中查看数据文件中所包含的信息。图形数据显示为色谱图或质谱。表中的数据显示为数据点。用户可以对数据执行各种排序操作。

当用户打开数据文件时，会出现不同的窗格，具体取决于所执行的实验类型。

如果在 **Tune Method Editor** 中选择了 **MCA** 复选框，则数据文件以质谱 (**MS**) 形式打开。如果没有选中 **MCA** 复选框，软件会用 **TIC** 打开数据文件。选择一个范围，然后在 **TIC** 窗格中双击一个特定的时间，以显示该范围的质谱。

软件将数据保存在扩展名为 **wiff** 和 **wiff.scan** 的文件中。一个数据文件可包含不止一个样本的数据。软件同时需要 **wiff** 和 **wiff.scan** 文件来打开数据文件。除数据文件外，软件还可以打开 **txt** 文件。一个 **txt** 文件仅包含一个样本的数据。

## Signal-to-Noise Ratio（信噪比）

信噪比是指峰高度除以噪声。

为了计算噪声，软件使用了色谱图中从 **Background Start** 到 **Background End** 时间（**Quantitation Method Editor** 和 **Peak Review** 窗口的高级参数中均有显示）的所有数据点的标准差（采用零均值）。当定义新背景范围时会设置这些时间。

如果用户构建方法时未定义新背景范围（接受预设积分而不进行任何更改时可能出现这种情况），则 **Background Start** 和 **Background End** 的值都显示为 **N/A**。因此，不会计算信噪比，结果表中的相应字段显示为 **N/A**。

## 平滑算法

用户可以选择平滑算法或者选择高斯平滑算法作为平滑方法。平滑操作是用每个数据点前后点的平均值来代替该数据点。经过平滑的数据集合将代替原来的数据集合。

数据可以平滑多次，但软件只能取消上一次平滑。

平滑操作不可用于多离子 (MI) 或 MRM 质谱。

### 平滑算法

进行数据平滑时，用户可以设置三个数据点的点加权值：当前点、前面的点以及后面的数据点。平滑算法是用数据点乘以指定的加权值，对这些数值求和，然后用该值除以点权重值之和。这比高斯算法更为平滑一些，但平滑噪声较大的数据时需要较长时间。

### 高斯平滑算法

高斯平滑要用每一个数据点两侧的一系列数据点的加权平均值来替代该数据点。每个新数据点的加权是基于高斯曲线计算的。这比平滑算法的平滑度差一些，但对于平滑噪声较大的数据而言是一个不错的选择。

使用高斯平滑算法设置两个值：

高斯过滤宽度（两个点之间的最小距离 %）：用于相邻点加权计算的宽度。这个宽度是用扫描中两个点之间距离的百分比表示的，预设宽度 100% 表示其分布范围与数据点之间的宽度相同。

高斯过滤极限（两个点之间的最小距离数）：高斯曲线的极限值，以两点之间距离的倍数表示。例如，预设值 10 生成的高斯曲线会将中心点两侧 10 倍数据点宽度之后的点截去。

## 用平滑算法平滑数据

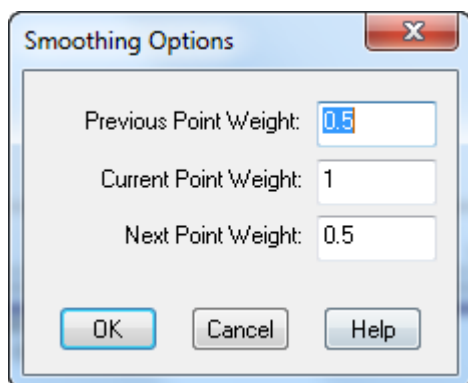
---

提示! 若要取消平滑，单击 **Edit > Undo**。软件支持取消上一级操作。

---

1. 选择一个含有色谱图或质谱的窗格。
2. 单击 **Explore > Smooth**。  
此时会出现 Smoothing Options 对话框。

图 5-13 Smoothing Options 对话框



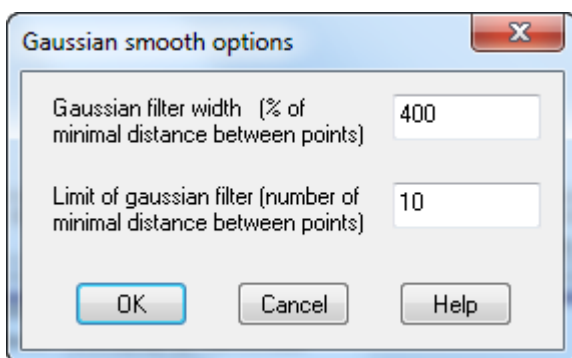
3. 在 **Previous Point Weight** 字段中，键入要应用到前一个数据点的加权系数。
4. 在 **Current Point Weight** 字段中，键入要应用到中心数据点的加权系数。
5. 在 **Next Point Weight** 字段中，键入要应用到后面数据点的加权系数。
6. 单击 **OK**。  
软件便会对数据集合进行平滑处理，并取代窗格中的当前数据集合。

## 用高斯平滑算法平滑数据

提示! 要撤消平滑，单击 **Edit > Undo**。软件支持一个级别的撤消操作。

1. 选择一个含有色谱图或质谱的窗格。
2. 单击 **Explore > Gaussian Smooth**。  
**Gaussian smooth options** 对话框随即打开。

图 5-14 **Gaussian smooth options** 对话框



3. 在 **Gaussian filter width** 字段中，键入用于寻找相邻点权重的宽度，以两点间距离的百分比表示。
4. 在 **Limit of gaussian filter** 字段中，键入高斯曲线的极限，以两点间距离的倍数表示。
5. 单击 **OK**。  
软件便会对数据集合进行平滑处理，并取代窗格中的当前数据集合。

## 系统日志

系统日志包含错误、警告和消息等系统事件的报告。使用 **Windows** 事件查看器可查看对于故障排除和执行系统诊断可能有用的信息。若要有效使用系统日志中的信息，过滤信息以仅显示与本软件相关的项。

要了解系统日志中的信息并排查错误，请参阅 **Windows** 应用程序事件日志。它包含相关的故障排查信息。

## 保存系统日志并转发给支持部门

1. 单击 **View > Event Log**。
2. 单击 **Windows Logs** 文件夹右侧的加号。

3. 右键单击 **Application**。
4. 单击 **Save All Events As**。  
此时会打开 **Save As** 对话框。
5. 键入文件名，然后单击 **Save**。  
**Display Information** 对话框随即打开。
6. 单击 **Display information for these languages**。
7. 确保选中 **English (United States)**。
8. 单击 **OK**。
9. 将文件附加到电子邮件，然后将其发送到 **SCIEX**。

---

注释: 如需其他登录功能以便排查问题，请联系 [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)。

---

## 筛选系统日志以获得与 **Analyst MD** 软件相关的信息

1. 单击 **View > Event Log**。  
**Event Viewer** 对话框随即打开。
2. 双击 **Windows Logs** 文件夹。
3. 单击 **Application**。
4. 单击 **Action > Filter Current Log**。  
**Filter Current Log** 对话框随即打开。
5. 选择 **Event Sources** 字段中的 **Analyst**。
6. 单击 **OK**。  
**Event Viewer** 对话框现在仅显示经过筛选的 **Analyst MD** 软件事件。



校正选项

计算选项用于定义校正曲线的参数，这些参数用于确定样本的计算所得浓度。在没有使用内标物的情况下，曲线是以标准物的面积和高度为参照的标准物浓度图表。如果使用了内标物，曲线便是以面积或高度比为参照的浓度比图表。该曲线与未知样本的面积（或高度）配合使用，可得出计算所得浓度的插值。

为项目选择最佳回归类型或将曲线与数据点拟合的最佳拟合方法，以及最佳的加权系数。

关于校正曲线

校正曲线用于确定样本的计算所得浓度，包括 **QC**（质量对照）样本。该曲线是通过将标准物的浓度对照其面积、高度或比率（如果使用内标物）绘制成图而得到的。而后将样本的面积或高度应用到该曲线上，就可以找到样本浓度，如结果表中所示。通过该校正曲线生成的回归方程用于计算未知样本的浓度。

软件以已知浓度（或比率）为 **X** 轴，计算所得面积（或比率）为 **Y** 轴。然后将批次中所有标准物的数据点绘制成图。系统通过所选的回归和加权类型，生成这些数据点的最佳拟合曲线。该曲线与未知样本的面积（或高度）配合使用，可得出未知样本浓度的插值。

选择最佳回归类型

选好回归类型（拟合）后，用户无法从向导程序中看到校准曲线。可以根据自己的经验使用预设值，或者按公司规定选择一种回归类型。

对拟合进行改动后，审核结果表内的 **Accuracy** 列是否更改。拟合方法越好，定量分析的精度就越高。

校准曲线将对照标准物的峰面积或高度（在使用内标物的情况下为比值）绘制其浓度曲线。当标准物的数据点绘制成图表后，确定这些数据点的最佳拟合方法，并在向导程序的 **Specify Calibration** 对话框中指出所做的选择。预设拟合方法为线性，即假定所有标准物的数据点都落在一条直线上。从下表中的拟合类型进行选择。

表 6-1 拟合类型

拟合	描述
线性	线性回归假定标准物的数据点都落在一条直线上。
过零点线性	过零点线性回归法假定标准物的数据点都落在一条直线上，且这些点的连线通过 <b>X</b> 轴和 <b>Y</b> 轴的零点。使用该设置可以强制直线经过零点。
二次	如果标准物数据点没有落在一条直线上，则使用二次回归方法对数据点进行二次拟合。

表 6-1 拟合类型 (续)

拟合	描述
平均响应因子	如果标准物数据点落在一条直线上，则若要求这些数据点的平均值，可以使用平均响应因子回归方法来获得曲线上每一个点的平均斜率。
幂	如果在点连线上有一些直线，有一些曲线，则应使用幂回归而非二次回归方式在这些拟合点之间的某处产生连线。

## 选择最佳加权系数

校准曲线将对照标准物的峰面积或高度绘制其浓度曲线。当标准物的数据点绘制成图表后，确定这些数据点的最佳加权系数，并在 **Specify Calibration** 对话框中指出该系数。预设拟合方法为 **None**，即假定曲线上的所有点具有相同的重要性。从下表中的加权类型进行选择。更多信息，请参阅以下章节：[加权系数](#)

表 6-2 加权类型

加权	描述
1/x	用 1/x 的加权系数可进一步提高对低数值点的强调程度。
1/x <sup>2</sup>	用 1/x <sup>2</sup> 的加权系数可大幅提高对低数值点的强调程度。
1/y	如果用面积（Y 轴）而非浓度（X 轴）进行校准，并且希望对低数值点作一定的强调，可使用 1/y 的加权系数。权重 1/y 是 1/x 的变量，其中 y 和 x 应彼此成正比。
1/y <sup>2</sup>	如果用面积（Y 轴）而非浓度（X 轴）进行校准，并且需要大幅提高对低数值点的强调程度，可使用 1/y <sup>2</sup> 的加权系数。权重 1/y 平方是 1/x 平方的变量，其中 y 和 x 应彼此成正比。
ln x	用 x 的对数强调高数值点。
ln y	用 y 的对数增加高数值点的权重。用面积（Y 轴）而非浓度（X 轴）进行校准时使用。

## 积分算法

Analyst MD 软件有两种积分算法：原有的 **Analyst Classic** 积分算法和 **IntelliQuan** 积分算法。**IntelliQuan** 算法可以提供一致性更好的找峰和积分功能，要调整的参数更少。

## Analyst Classic 和 IntelliQuan 积分算法

**IntelliQuan** 算法使用两个找峰参数之一：**Automatic IQA II** 无参数设置或 **Specify Parameters MQ III**。用 **IntelliQuan** 算法对峰进行积分后，用户可以选择哪个找峰参数最适合数据集合。这是在 **Peak Review** 窗格或窗口中显示的峰积分参数中完成的。

下表显示了可用于 **Analyst Classic** 算法的参数。

表 6-3 Analyst Classic 算法

参数	定义
<b>Default Bunching Factor</b>	为了找峰而对一定数量的点一起求平均值，并将其作为一个点来考虑的数据点数量。
<b>Default Number of Smooths</b>	对色谱图进行平滑的次数。
<b>Default Void Volume Retention Time</b>	在该时间之前出现的所有峰均被忽略。
<b>Default Concentration Units</b>	用于描述样本浓度的浓度单位，如 pg/μL。
<b>Default Calculated Concentration Units</b>	用于描述计算所得样本浓度的浓度单位，如 pg/μL。
<b>Default RT Window</b>	位于找峰预计保留时间中央的时间窗口。例如，一个 30 秒的保留时间窗口，可以使预计保留时间前和后各多出 15 秒。

下表显示了为 MQ III 算法而不是 IQA II 算法提供的参数。

表 6-4 MQ III 算法

参数	定义
<b>Default Noise Percentage</b>	找峰中所使用的阈值。只有比指定百分比高的峰才能被检测到。
<b>Default Baseline Subtraction Window</b>	每个数据点周围的时间窗被用来确定待应用到该点的基线校准的高度。该时间窗有助于消除色谱图中的过多噪声。基线是指在指定时间窗口内，连接指定数据点左侧的最小强度点和右侧最小强度点的连线。
<b>Default Peak-Splitting Factor</b>	用于控制给定的峰簇是由多个邻近峰还是一个（可能是含噪声的）峰组成。如果强度谷低于指定值，则报告一个峰。否则，峰谷处强度最小的点便将峰簇分成两个独立的峰。系数设得大会妨碍峰簇分离为一个以上的峰。
<b>Default Void Volume Retention Time</b>	在该时间之前出现的所有峰均被忽略。
<b>Report Largest Peak</b>	选择该参数可以返回保留时间窗内的最大峰。如果未选择该参数，软件就会找到距离预计保留时间最近的峰。预计保留时间是在 Quantitation Wizard 中自动计算的。

下表显示了对两种 IntelliQuan 算法均可用的参数。

表 6-5 用于 IQA II 和 MQ III 的 IntelliQuan 算法

参数	定义
Default Minimum Peak Height	峰积分所要求的最小峰高度。
Default Minimum Peak Width	峰积分所要求的最小峰宽度。
默认 RT 窗	指定位于找峰预计保留时间中央的时间窗口。例如，一个 30 秒的保留时间窗口，可以使预计保留时间前和后各多出 15 秒。
Default Smoothing Width	数据平滑中所使用的点数。
Default Concentration Units	用于描述样本浓度的浓度单位，如 pg/μL。
Default Calculated Concentration Units	用于描述计算所得样本浓度的浓度单位，如 pg/μL。

## 定量方法创建工具

本软件中提供了四种定量方法创建工具，每一种都可以创建一个功能完整的方法。如何选择最佳工具取决于要完成的任务。

我们建议，只有精通方法开发的用户才可创建或修改采集和定量方法。

有关角色和安全性的更多信息，请参阅文档《实验室主管指南》中的以下章节：关于人员与角色。

## 向导程序

可用的方法创建向导程序包括 **Standard Quantitation** 向导程序和 **Automatic Quantitation** 向导程序。使用这两种向导程序都可以选择待定量的批次、创建或选择定量方法，然后对样本数据进行积分。

两者的差别在于所创建的方法类型。**Standard Quantitation** 向导程序创建的是标准方法，而 **Automatic Quantitation** 向导程序创建方法并自动生成结果表。使用 **Automatic Quantitation** 向导程序时，在创建方法过程中无需验证各个峰。不过，在积分完成后，仍可以对各个峰进行检查。

两种方法只有一种共同情况无需验证峰：即定量操作只是为了积分，而不是确定浓度。例如，如果有一个批次中含有每一个样本的不同化合物，或者各个样本之间的质量不相同，可能需要这么做。如果是这种情况，可使用自动向导程序。否则，若要进行定量，请使用 **Standard Quantitation** 向导程序。

在采集样本后使用 **Standard Quantitation** 向导程序执行以下操作：

- 选择一个代表性样本。
- 选择分析物和内标物的峰。
- 调整找峰和积分参数。
- 在方法创建过程中查看峰。
- 选择校准。

使用 **Automatic Quantitation** 向导程序选择一个批次，创建一个方法（没有峰确认），然后对样本数据进行积分。该向导程序比 **Standard Quantitation** 向导程序速度更快，而且对所有样本都没有扫描质量相同的要求。不过，它不允许选择内标物—所有离子均被视为分析物。

采集样本后在以下场景中使用 **Automatic Quantitation** 向导程序：

- 您想选择校准。
- 您不想调整找峰和积分参数。
- 您不想选择分析物峰名称。
- 您不要任何内标物。
- 不想在方法创建过程中检查峰，或者每个样本中的化合物各不相同。

如果只要进行峰积分，就无需进行验证，因为该过程无需计算浓度。此时可使用 **Automatic Quantitation** 向导程序，这样就可以在积分后进行峰检查。

## 用自动方法找峰

除以下情况外，软件均采用标准峰检测程序：

- 使用（向导程序中）现有的群聚系数和平滑次数。
- 对每一个峰单独计算预计保留时间、噪声和面积阈值。

## Quantitation Method Editor

在采集样本后使用此选项执行以下操作：

- 调整找峰和积分参数。
- 选择分析物和内标物的峰。
- 选择校正。

使用 **Quantitation Method Editor** 完成另外三项任务：

- 汇总离子进行积分。
- 使用不同时段或实验的内标物（如果内标物是在与分析物不同的时段或实验中采集的）。
- 编辑现有纪录。

## Semi-Automatic Method Editor

Semi-Automatic Method Editor 是 Batch Editor 的一部分。用户可以在数据采集之前，用 Semi-Automatic Quantitation Method Editor 选择定量信息，如样本类型和样本浓度。这样的准备工作能够让后面的定量分析更容易。或者，也可以在 Batch Editor 中选择一种完整的方法，在批次运行结束后能够自动应用，并生成定量结果表。

如果使用 Quick Quant 功能在数据文件中存储样本类型和浓度，请勿使用自动生成的 Quick Quant 方法执行定量分析。此定量方法不会使用已针对谱峰选择而进行了优化的化合物和样本特异性积分参数。

在以下场景中使用此选项：

- 尚未使用相同的采集方法采集任何样本。
- 您要选择分析物和内标物峰的名称和质量。
- 您要在批次编辑器的 Quantitation 选项卡中选择浓度和样本类型，但没有任何其他定量方法。
- 在必要的情况下，您要稍后再对定量方法进行编辑。

### 用半自动方法找峰

除以下情况外，软件均采用标准峰检测程序：

- 它使用的是现有的群聚系数（来自 Quantitation Method Options）对话框和平滑次数（来自 Create Semi-Automatic Quantitation Method）对话框。
- 它使用的是浓度最高的标准物作为代表性样本。它使用的是色谱图中最大的峰来建立保留时间。
- 它使用的是得到的基线噪声来设置噪声和面积阈值。（该过程与正常方法中峰的预设值设置方式相同。）这些积分参数将被应用到所有其他样本。
- 如果正在检查的批次中不含定量信息（样本类型和浓度），每个峰的保留时间和阈值就会单独计算（同全自动方法）。

## 度量图表

度量图表以图形方式，在 X 轴或 Y 轴上显示结果表列中的数据，或者将两列中的数据彼此对照绘制成图。本节主要介绍如何生成并使用度量图表。

一些预定义的度量图表也包括在内：

- Int\_Std\_Response（用于找到问题样本）
- Analyte\_Area versus Height（用于验证色谱图行为）
- PK profile（浓度与时间点对照，在样本查询后运行）

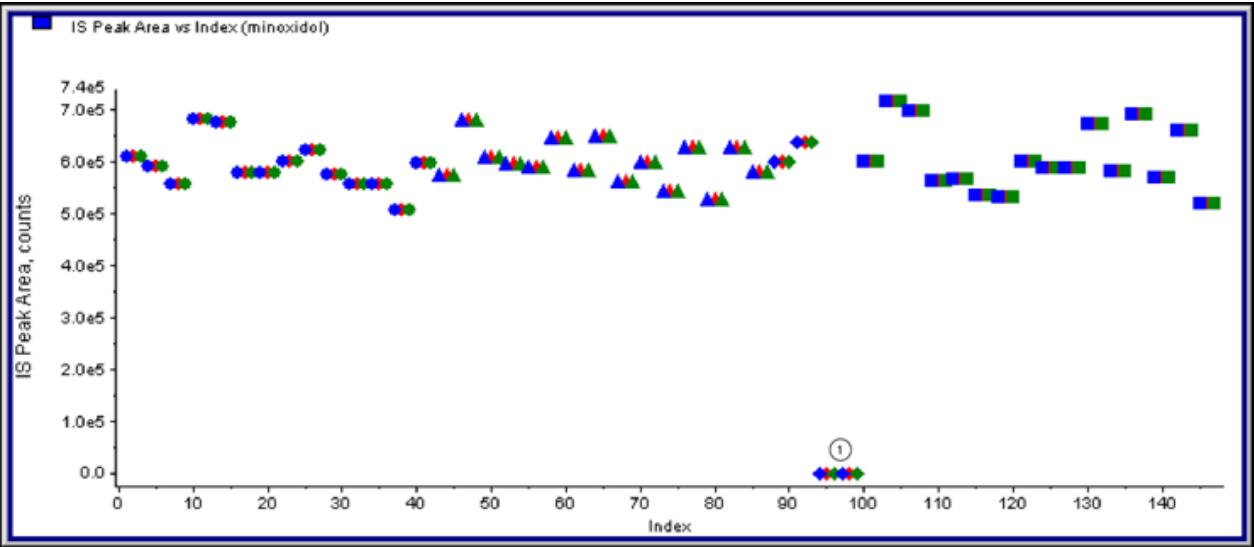
使用度量图表可绘制指定列的图，如结果表中的 **Analyte Peak Area**、**Accuracy** 或 **Calculated Concentration**。两个结果表字段也可以相互绘制。然后，可以调查显示在正常范围外的点。度量图表经常与查询一起使用。有关查询的更多信息，请参阅文档：《帮助》。

通过以下方式生成度量图表：

- 使用 **Plot** 按钮绘制当前结果表中的一列或多列数据的图表，但不保存绘图标准。
- 创建一个表专用图表，将绘图标准与当前表一起保存。
- 创建一个通用图表，保存绘图标准，供今后的结果表使用。

校准曲线上不会显示 QC 样本、未知样本、空白样本、双空白样本和溶剂，但可以生成它们的度量图表。

图 6-1 参照样本索引描绘的内标物峰面积度量图表示例



项目	描述
1	双空白样本

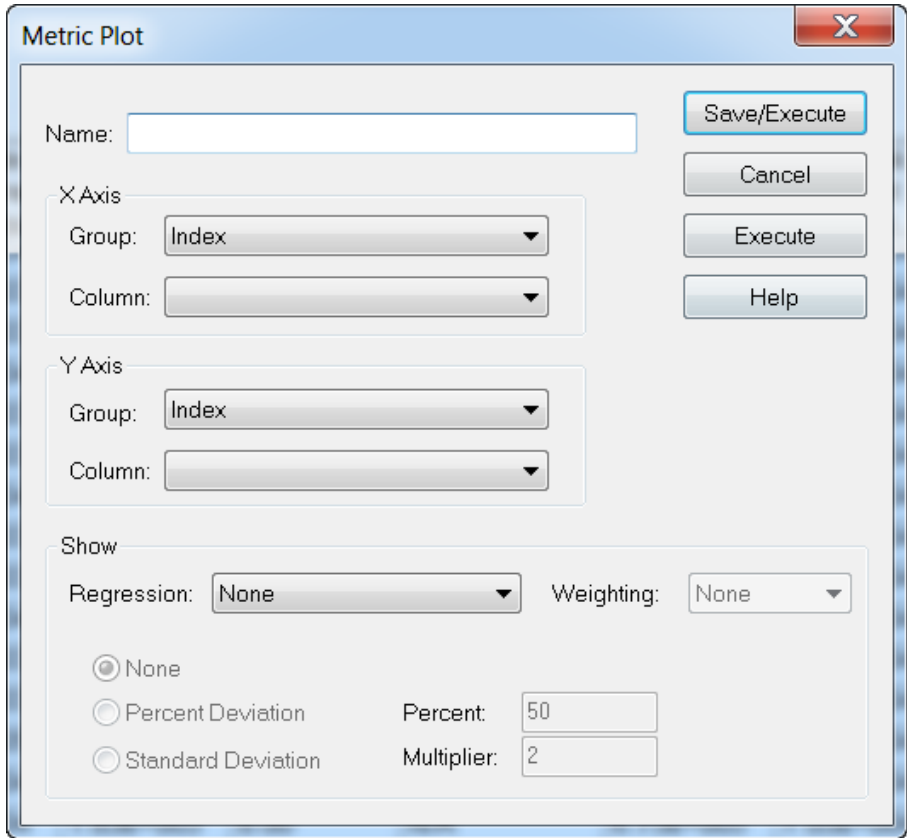
生成临时度量图表

1. 在结果表打开的情况下，采取以下某一项操作：
  - 若要沿 Y 轴绘制数据图表并以 X 轴为参照，单击要绘制的数据列的题头。
  - 若要以选定的第一列为 X 轴、以选定的第二列为 Y 轴开始绘图，按住 **Ctrl** 键并单击列题头，选择两个数据列。
2. 单击结果表上方的 **Metric Plot by Selection** 图标。  
此时度量图表便会打开。
3. 在图表窗格中单击右键，然后单击 **Data Legend** 查看图表中所用颜色的相关说明。
4. 在图表窗格中单击右键，然后单击 **Point Legend** 查看图表中所用符号的相关说明。

创建度量图表并保持绘图标准

1. 打开相应的结果表。
2. 在结果表中单击右键，然后单击 **Metric Plot > New**。

图 6-2 Metric Plot 对话框



3. 在 **Name** 字段中，键入新绘图标准的名称。
4. 在 **X-Axis** 组的 **Group** 列表中，选择 **Index**，然后将 **Column** 列表留空以使用 X 轴作为指数描绘 Y 轴上的字段。
5. 如有必要，在 **Y-axis** 组的 **Group** 列表中，选择 **Internal Standard**，然后在 **Column** 列表中选择 **IS Peak Area** 以交互地描绘两个列。
6. 如有必要，在 **Regression** 列表中，选择要使用的回归分析类型，然后选择相应的回归设置。
7. 若要生成图表并保持绘图标准，单击 **Save/Execute**。  
此时度量图表便会打开。更多信息，请参阅下图：图 6-1。
8. 在图表窗格中单击右键，然后单击 **Data Legend** 查看图表中所用颜色的相关说明。
9. 在图表窗格中单击右键，然后单击 **Point Legend** 查看图表中所用符号的相关说明。  
此标准集合现在可用于该结果表以后的绘图操作。在结果表中单击右键可访问该标准。绘图标准也可编辑。
10. 若要查看有问题的样本，可尝试对照时间来绘制未知样本的浓度图，或者对照索引绘制内标物的面积。

## 保存默认绘图标准供以后的结果表使用

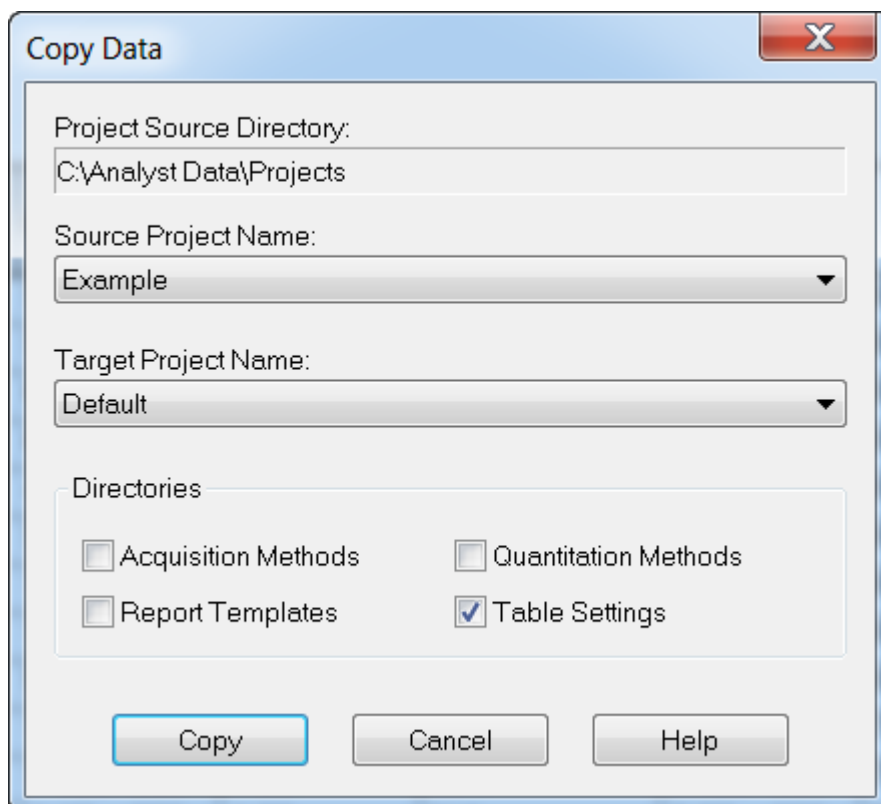
1. 在结果表中单击右键，然后单击 **Table Settings > Export To New Table Settings**。



这样就可以从 **rdp** 文件中导出结果表设置，从而可以在项目内的其他定量运行中重复使用。

2. 若要将表设置导出到其他项目，单击 **Tools > Project > Copy Data**。

图 6-3 Copy Data 对话框



## 噪声和面积阈值参数

若要识别峰，软件就需要一套噪声和面积阈值参数。软件会对这些参数进行初始化设置，但用户此后可以进行改动。软件按下述方式设置参数：

1. 软件计算出任两个相邻数据点之间的最大强度差。该数字代表了两个点之间的强度差，而非实际强度本身。
2. 对于每一对强度差小于第 1 步中计算结果 **5%** 的数据点，软件会计算出强度差的标准差（采用零均值）。软件不会使用强度差大于最大值 **5%** 的数据点对。
  - 噪声阈值等于第 2 步中计算得出的标准差。
  - 面积阈值等于噪声阈值的 **5 倍**。

注释：噪声和面积阈值的最小值均为 **0.000001**。如果上述计算得出的值比该最小值小，软件便会将该阈值重置为 **0.000001**。

## 重新计算噪声和面积阈值

如果定义了新背景区域，则软件会如下所述重新计算噪声和面积阈值。

对于每一对相邻的数据点，软件都会用强度差的零均值计算标准差。**Analyst MD** 软件会使用选定范围内的所有数据点，因为已在软件中明确所选择的区域为背景噪声。

- 噪声阈值等于从选定范围计算得出的标准差。
- 面积阈值等于噪声阈值的 5 倍。

注释：噪声和面积阈值的最小值均为 0.000001。如果上述计算得出的值比该最小值小，软件便会将该阈值重置为 0.000001。

## 峰积分

以下是用于发现基线并在找到峰的情况下计算基线积分的积分类型。

- **Manual**：峰积分由用户手动进行。
- **Automatic**：峰积分按下列方式进行：
  - **Baseline-to-baseline**：峰面积由峰起点和终点处到基线的垂直线确定。这种积分类型只有在峰没有其他紧邻峰的情况下适用。
  - **Valley**：与基线到基线方法相同，唯一差别在于它仅适用于有另一个紧邻峰的峰。
  - **Exponential Skim**：峰面积是指数平滑方法中的主峰或母峰。
  - **Exponential Child**：峰面积是指数平滑方法中的子峰。

## Peak Review

在谱峰检查过程中，用户可以检验软件所选择的峰，然后重新定义谱峰或其起点和终点（如有必要）。

一般来说，该软件比较擅长准确找到分析物和内标物的峰。不过出于各种原因，包括样本采集和定量方法定义，软件有时候会错过正确的峰，选择错误的峰，或者根本无法找到峰。有时候，尽管软件能够正确找到峰，但用户可能会认为软件选择的起点或终点不对。

### 峰检查提示

目的	方法
峰积分：检查峰	若要检查所有峰，需确定所有样本均已在结果表中列出。  <b>Peak Review</b> 窗口包含结果列表中列出的峰。如果表中隐藏了某些样本（例如应用了某个查询），这些样本在峰检查过程中也会隐藏。

目的	方法
峰积分：移至批次中的第一个峰	在 <b>Peak Review</b> 窗格中的任意位置单击右键，然后单击 <b>Show First Page</b> 。若要移至批次中的最后一个峰，在 <b>Peak Review</b> 窗格中的任意位置单击右键，然后单击 <b>Show Last Page</b> 。

## 检测峰

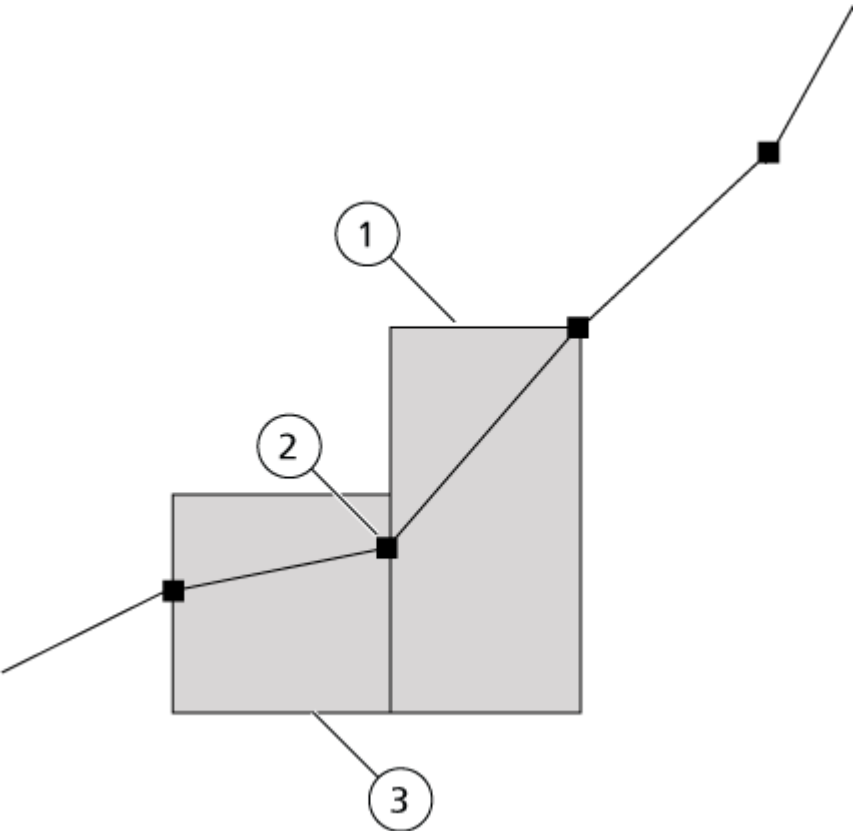
软件检测峰可以分为四个步骤。

1. 软件通过检验每个群聚点与前一个点之间的距离来找到潜在的峰起点。当距离超过当前噪声阈值时，软件就能找到一个可能的峰起点。
2. 软件会通过确定一行中是否有足够的点超过面积阈值来确认峰的起点。
3. 它通过搜索比前一个的点低的点来找到峰顶。
4. 通过确定一个群聚点与下一个点之间的距离低于噪声阈值的位置，便可找到峰的终点。必要时，再对峰进行区分。

## 找到潜在的峰起点

为了找到一个峰的潜在起点，软件会从第一点开始，测量连续群聚点对之间的强度差。当软件发现强度差超过当前噪声阈值时，就会认定第一个点为潜在的峰起点。

图 6-4 找到潜在的峰起点



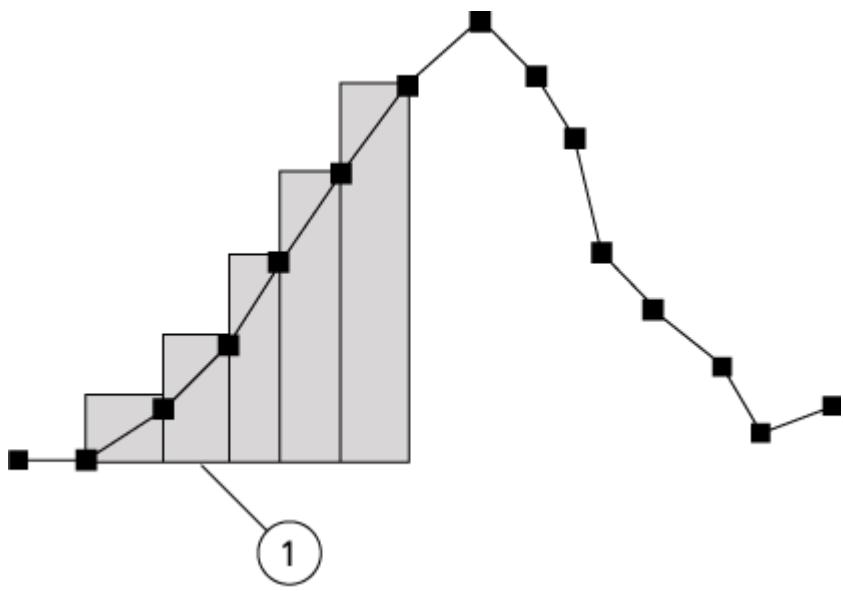
项目	描述
1	超过噪声阈值
2	潜在的峰起点
3	没有超过噪声阈值

### 确认峰起点

为了确保找到了真正的峰，软件会从潜在的峰起点开始，沿着曲线将每个群聚数据点的强度之差相加，以计算总和。当相邻点之间的强度差低于噪声阈值时，该过程便会停止。所求得的是峰上升沿面积的近似值。如果该和超过面积阈值，软件就会确认峰的起点。

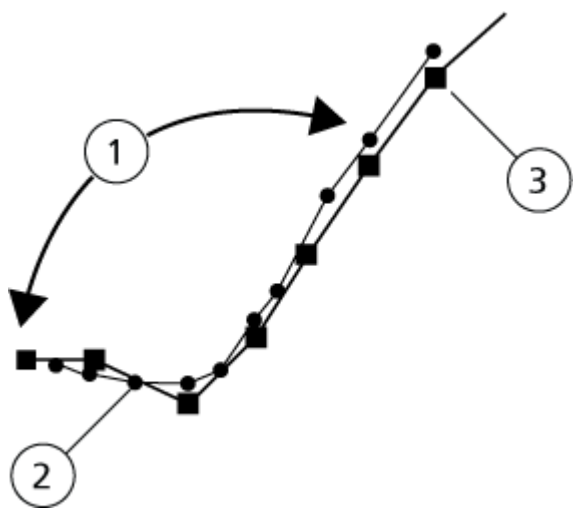
接下来，软件会从潜在的峰起点向后移动，直至其发现峰的最低点，以此来确定峰的实际起点。软件会向后移经 5 个原始数据群。该点即为实际峰起点。

图 6-5 确认峰起点



项目	描述
1	将大于面积阈值的小块面积加总

图 6-6 确认峰的实际起点



项目	描述
1	查看该区域的所有数据点
2	最小数据点
3	潜在的峰起点

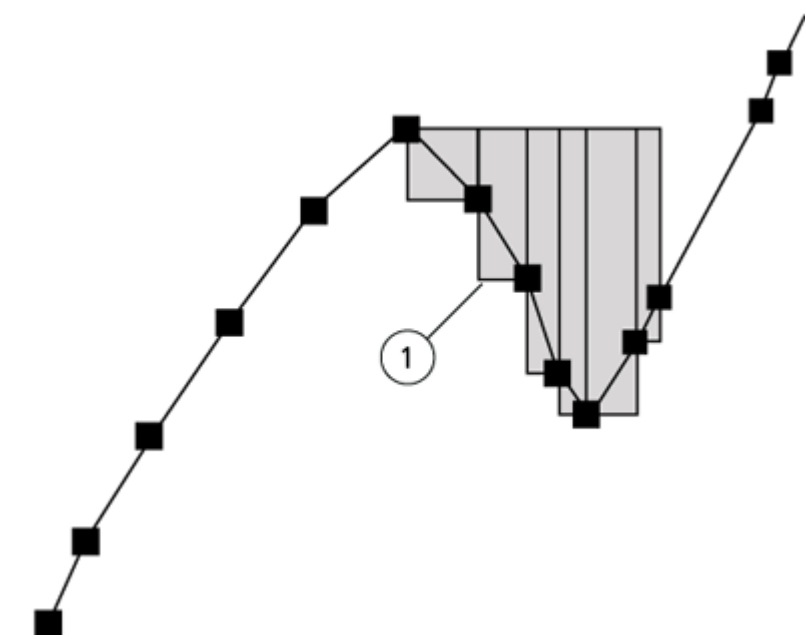
## 找到峰顶

要找到峰顶，软件首先要寻找一个比前一个点更低的点。然后，要确定是否已经正确找到峰顶，需要求出潜在的峰顶与其后的群聚点之间的强度差之和，一直到峰的终点。如果点之间的总距离超过了面积阈值的  $\frac{2}{3}$ ，峰顶便得到确认。也就是说，软件先确保它是一个峰，然后再回头去找峰顶。

不过，如果软件在面积检测通过之前发现了一个更高的群聚点，就会确定一个新的峰顶，然后重新开始面积检测。

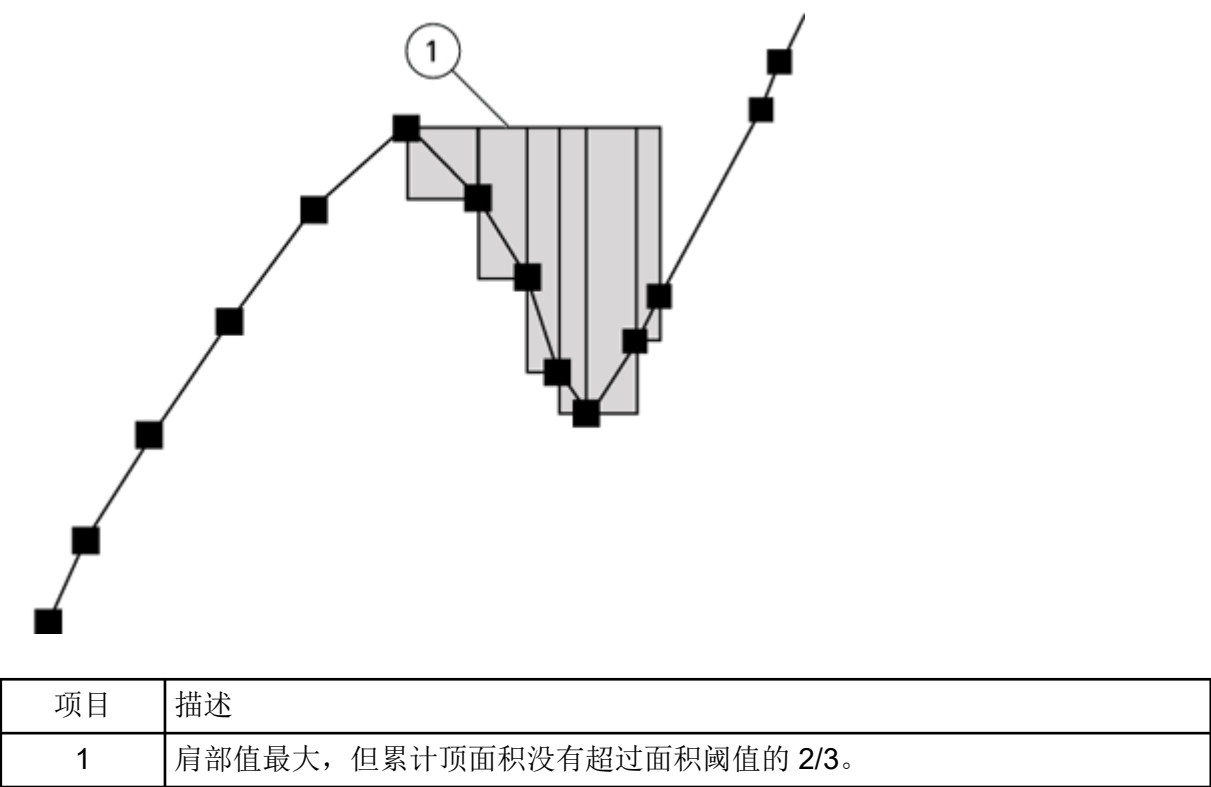
注释：峰的实际保留时间并非上述过程发现的点那么简单。软件会根据三个最高的数据点，通过二次拟合来确定。

图 6-7 找到峰顶



项目	描述
1	小块面积之和大于面积阈值的 $\frac{2}{3}$ 。

图 6-8 确认新峰顶



## 找到峰终点

在下列情况下，软件会确认找到峰的终点：

- 连续两点之间的差未能通过噪声阈值检测。
- 软件发现一个新的峰起点。

在上述任一种情况下，前 5 个群聚点的最低群聚点将被认为是峰的实际终点。

软件通常会找到每个色谱图的若干个峰。它所选择的峰是保留时间最接近方法中指定的预计保留时间的峰。如果没有峰的保留时间在设定范围内，软件就会将未找到的峰进行标注。

图 6-9 找峰

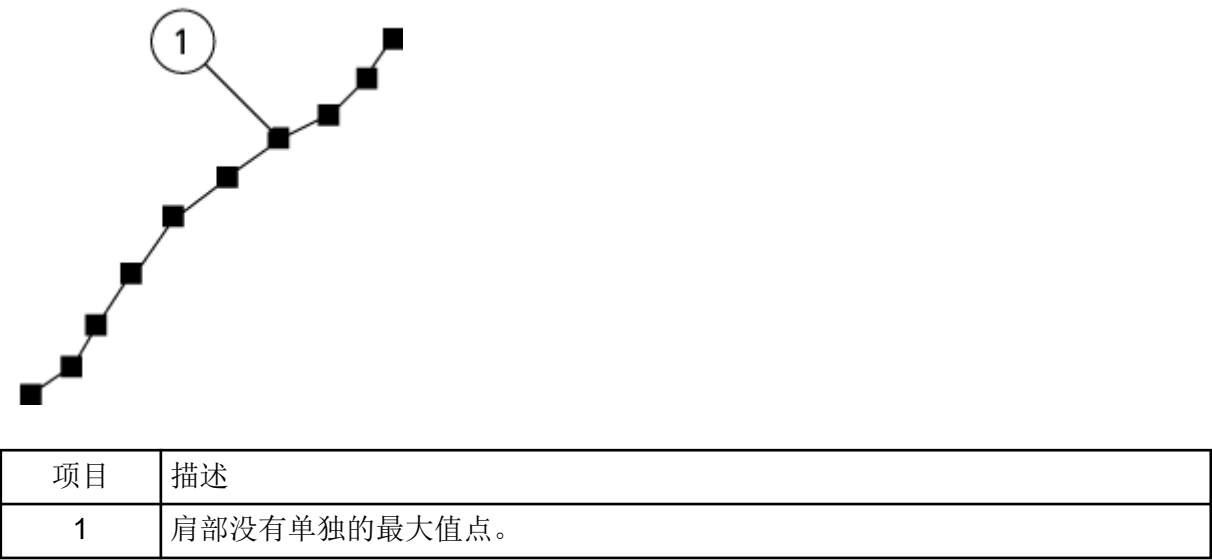
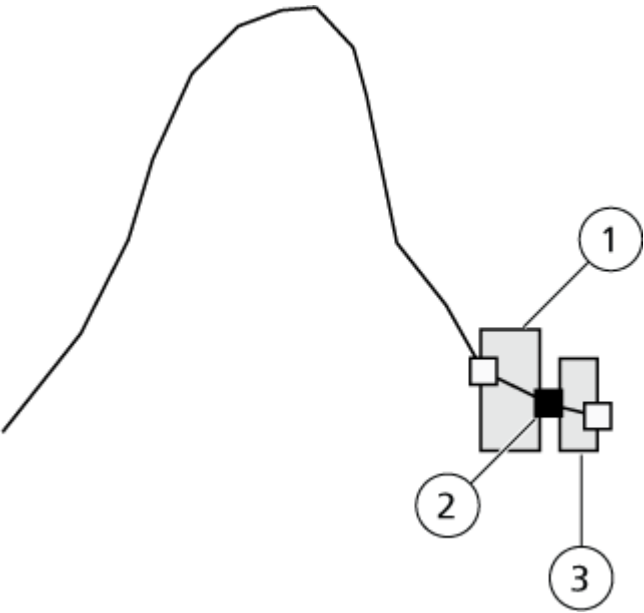


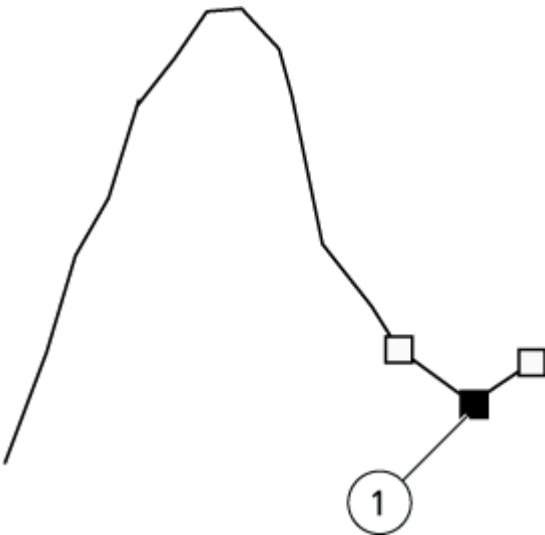
图 6-10 找到峰终点：情况 1





项目	描述
1	超过噪声阈值
2	峰终点
3	没有超过噪声阈值

图 6-11 找到峰终点：情况 2



项目	描述
1	峰终点

### 单独的峰

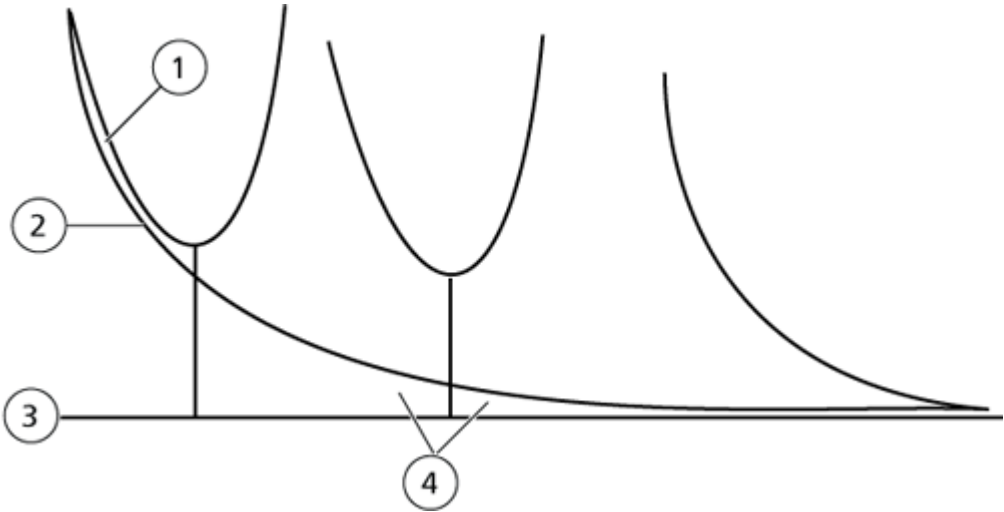
如果在当前的峰触碰基线之前有一个新的峰已经开始，软件就会基于以下标准决定是否使用指数平滑方法来消除基线。平滑线将在前体离子后面的一个或多个峰之下经过。这些峰被称为产物峰。

当软件执行指数平滑时，会从产物峰中减去平滑线下面的面积，并将其加到前体离子峰中。然后，它会从前体离子峰中减去平滑线上方的小面积，并将其加到第一个产物峰中。

软件使用以下标准来确定是否采用指数平滑：

- 指数峰值比
- 指数调整比
- 指数谷值比

图 6-12 单独的峰：指数平滑



项目	描述
1	该面积从前体离子峰中减去，并加到第一个产物峰
2	指数平滑
3	离子簇基线
4	这些面积从产物峰中减去，并加到前体离子峰

## 查询

查询是一种只选择符合一定标准的记录的方法。用户可以根据文字或算法选择，使用查询在结果表中查看感兴趣的特殊数据部分。保存在项目中的查询可用于该项目内的所有结果表。

当使用一个查询时，表中就只显示符合选定标准的数据行。所有的列均显示。用户可以对第一次查询所显示的行进行第二次查询，以进一步细化选择。

使用预定义的选项和键入的条目创建一个可以执行、保存或修改的查询。查询的每一行与布尔查询的工作原理相似，是对照结果表的列运行的，以确定显示哪些结果。查询的每一行只选择显示符合标准的记录。可以定义预设或表特定的查询。

我们建议用户验证用来分析结果表中数据的任何查询。

## 样本类型查询

如果设计了一个仅选择标准样本类型的查询，结果表就会显示在 **Sample Type** 列中含有 **Standard** 的数据行。

## 默认查询和特定表查询

默认查询通常用于确定不符合一定标准的样本。特定表查询通常用于确定符合一定标准的记录。

默认查询通常用于查找质量对照物或标准物的问题。如果您在 **Quantitation Method Wizard** 中选择了 **QC** 和标准物的浓度和最大差异，结果表就只显示该范围以外的样本。如果结果表没有显示任何内容，则说明所有样本均符合要求。如果选中了 **Execute Query as Standard Query** 复选框，结果表中的所有样本都将显示，但 **Standard Query Status** 列中会显示 **Fail** 或 **Pass** 状态，具体取决于样本是否通过了查询。

特定表查询是对照一份显示的结果表运行的，用于选择符合一定标准的记录。在表中单击右键，就可以通过右键菜单设计这些查询。保存和导出一个查询可供今后的结果表使用。

#### 特定表设置或通用设置

当使用表设置选项时，程序可以是特定于表或通用的。

- **特定表设置：**当在表中修改表设置时，改动的只是该表中的设置。但是，它们可以导出为通用设置。
- **通用设置：**当修改通用设置时，所改动的是将应用到今后的结果表的一组设置。若要自定义创建的结果表，在 **Create Quantitation Set** 上选择一组设置：选择 **Settings & Query** 页。如果未选择一组设置，软件将自动使用预设设置。

## 精度差异如何影响结果

对预设查询来说，精度是以百分数表示的，并对该数字进行增减。例如，如果在 **Create Default Query** 对话框中的 **Maximum Variation for standards** 字段中键入 10，结果表中就会显示标准物精度在 90% 和 110% 以外的所有记录。如果键入 5，结果表中只显示所含标准物精度小于 95% 和大于 105% 的标准物。请参阅以下章节：[结果表](#)。

## 回归方程

本部分主要介绍用于计算回归曲线的方程。在下列等式中，**x** 代表标准物样本的分析物浓度，而 **y** 则代表相应的峰面积或高度。用于回归计算的变量取决于是否使用了内标物以及所使用的峰面积或高度是否如下表所示。

表 6-6 回归变量

是否使用了内标物？	是否使用了面积？	<b>x</b>	<b>y</b>
是	是	$C_a / C_{is} / DF$	$A_a / A_{is}$
是	否	$C_a / C_{is} / DF$	$H_a / H_{is}$
否	是	$C_a / DF$	$A_a$
否	否	$C_a / DF$	$H_a$

其中：

- $C_a$  = 实际分析物浓度
- $C_{is}$  = 内标物浓度
- $DF$  = 稀释系数
- $A_a$  = 分析物峰面积

- $A_{is}$  = 内标物峰面积
- $H_a$  = 分析物峰高
- $H_{is}$  = 内标物峰高度

## 拟合选项

Fit 指示要应用到数据的回归分析的类型。各种拟合选项是线性、过零点线性、平均响应因子、乘方和二次方程。

### 线性回归

线性回归假定标准物的数据点都落在一条直线上。

线性校正等式为：

$$y = mx + b$$

斜率和截距的计算方式为：

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

其中：

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

### 过零点线性

过零点线性回归法假定标准物的数据点都落在一条直线上，且这些点的连线通过 X 轴和 Y 轴的零点。使用该设置可以强制直线经过零点。

过零点线性的校准等式是：

$$y = mx$$

斜率的计算方式是：

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

### 平均响应因子

平均响应因子校准等式为：

$$y = mx$$

这与线性过零点校准用的是相同的等式。不过斜率的计算方式不同：

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

响应因子的标准差则是：

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

其中：

$$D = \sum w \cdot \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

注释：X 值为零的点不予求和。

如果在点连线上有一些直线，有一些曲线，则应使用幂回归而非线性或二次回归方式在这些拟合点之间的某处产生连线。

## 幂

幂函数校准等式为：

$$y = ax^p$$

线性校准等式的用法如上所述，它被用于计算斜率 (m) 和截距 (b)，只不过这些等式中的 x 用  $\ln x$  代替，而 y 则用  $\ln y$  代替。这一步完成后，a 和 p 的计算方法为：

$$a = e^b$$

$$p = m$$

如果有任何 x 或 y 值为负或零，软件就会报告错误。

## 二次

二次校准等式如下所示：

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

多项式系数的计算如下：

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^2) / \sum w$$

其中：

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$
$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$
$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

加权系数

下表显示的是七种加权类型中的加权系数 (w) 是如何计算的。

表 6-7 加权系数

加权类型	权重 (w)
无	始终是 1.0。
1 / x	如果  x  < 10 <sup>-5</sup> ，则 w = 10 <sup>5</sup> 。否则，w = 1 /  x 。
1 / x <sup>2</sup>	如果  x  < 10 <sup>-5</sup> ，则 w = 10 <sup>10</sup> 。否则，w = 1 / x <sup>2</sup> 。
1 / y	如果  y  < 10 <sup>-8</sup> ，则 w = 10 <sup>8</sup> 。否则，w = 1 /  y 。
1 / y <sup>2</sup>	如果  y  < 10 <sup>-8</sup> ，则 w = 10 <sup>16</sup> 。否则，w = 1 / y <sup>2</sup> 。
ln (x)	如果 x < 0，则会报错。如果 x < 10 <sup>-5</sup> ，则 w = ln 10 <sup>5</sup> ，否则 w =  ln (x) 。
ln (y)	如果 y < 0，则会报错。如果 y < 10 <sup>-8</sup> ，则 w = ln 10 <sup>8</sup> ，否则 w =  ln (y) 。

报告模板

本部分介绍报告模板中使用的各种元素，这些元素使用 Analyst MD 软件导航栏 **Configure** 部分中的 **Report Template Editor** 创建。

以下信息可添加至报告页眉和页脚。

注释: 在编辑现有报告模板之前，先保存好备份。

表 6-8 基本设计要素

要素	定义
Printing Date	(打印日期) 打印文件的日期。
Printing Time	(打印时间) 打印文件的时间。
Operator	(操作人员) 打印文件的操作人员。
Workstation	(工作站) 打印文件的工作站。
Page n of N	(第 n 页，共 N 页) 页码和总页数。
Custom Field	(自定义字段) 在此创建自定义文本。
Analyst Version	(Analyst 版本) Analyst MD 软件的版本。
User Type	(用户类型) 用户类型 (安全)。

表 6-8 基本设计要素 (续)

要素	定义
<b>Electronic Signature</b>	(电子签名) 表示是否启用或禁用电子签名功能 (安全)。

表 6-9 采集要素

要素	定义
<b>Acquisition File</b>	含样本采集信息的数据文件的名称。
<b>Acquisition Date</b>	样本采集日期。
<b>Acquisition Time</b>	样本采集时间。
<b>Operator</b>	负责运行样本批次的操作人员的姓名。
<b>Batch Name</b>	批次的名称。
<b>Sample Number</b>	样本的相关编号。
<b>Sample Name</b>	样本的名称。
<b>Sample Comment</b>	显示 Acquisition Method Editor 中键入的样本的相关评注。
<b>Sample ID</b>	样本的标识号。
<b>Scan Mode</b>	全谱扫描中, 系统计算某次扫描质点所使用的方法。
<b>Scan Type and Polarity</b>	采集扫描类型 (Q1、Q3、MRM、产物离子、前体离子、中性丢失/获得) 以及采集方法的极性 (正或负)。
<b>Scan Mass(es)</b>	待扫描的离子或离子碎片。
<b>Dwell Time</b>	系统扫描特定质量所需要的时间。
<b>Pause Time</b>	质量范围扫描之间或实验之间的暂停时间。
<b>Ion Energy</b>	采集方法的离子能量, 与 IonSpray 离子源的电压或碰撞能量有关。
<b>Collision Energy</b>	采集方法的碰撞能量, 与 IonSpray 离子源的电压有关。
<b>Period and Experiment</b>	时段中包含了一个实验集合。实验包含若干性质, 例如 <b>Scan Type</b> 、 <b>Scan Mode</b> 、 <b>Resolution</b> 、 <b>Ion Source Parameters</b> , 以及质量范围或质量的集合。
<b>State Table Parameters</b>	实验中所使用的质谱仪参数。
<b>Pump</b>	实验中所使用的泵的名称。
<b>Autosampler</b>	实验中所使用的自动进样器的名称。
<b>Custom Annotation</b>	在 Batch Editor 中添加的自定义文本。

表 6-9 采集要素 (续)

要素	定义
Collected By	负责搜集数据者的姓名。

表 6-10 定量要素

要素	定义
<b>Results Table Name</b>	结果表的名称。
<b>Results Table Path</b>	结果表的位置。
<b>Method Name</b>	定量方法的名称。
<b>Method Path</b>	方法文件的位置。
<b>Project Name</b>	项目的名称。

## 自定义报告

Report Template Editor 提供了一种通过设置题头、脚注和版面来自定义报告的方法。您可以使用报告模板进行打印输出，或将数据导出到其他应用。

打印输出中包含了若干元素类型：

- 窗口：窗口在软件窗口的工作区中打开，位于工具栏下方，导航栏右侧。打印窗口时会将其显示的所有内容悉数打印出来。
- 窗格：窗格是窗口的一部分，按照互不重叠的方式排布，而且始终能完全看到。比如，**Method Editor** 窗口中含有两个窗格—**Browser** 窗格和 **Method Editor** 窗格。用户可以打印窗口中每一个窗格的信息。
- 报告：报告是在软件中创建的按一定结构组织的信息集合。有些报告可以直接打印，如校正报告。其他信息必须导出，如批次和定量结果表。

## 预览、打印和导出报告

采集方法、批次、定量结果表和图形结果表可作为报告导出。其他信息形式（如计算器数据）也可以导出，但不能用报告模板进行自定义。

屏幕上显示的多数区域都可以打印。使用打印预览功能，用户可以预览、缩放或复制图形。

导出的报告会以适合程序的文件格式保存，如记事本、**Microsoft Word**、**Excel** 或 **LIMS**（实验室信息管理系统）软件。

用下列格式导出报告：

- csv
- doc
- pdf
- txt



可用格式取决于导出的信息。例如，图形可导出为 pdf 文件。数据表可导出为 txt 文件。

若要在报告的页眉和页脚中包含其他信息，可使用相应的报告模板打印报告。

表 6-11 预览、打印和导出报告

目的	方法
若要预览图形	单击 <b>File &gt; Print Preview &gt; Pane.</b>
打印没有模板的报告	单击 <b>File &gt; Print</b> ，然后单击要打印的报告。
打印有模板的报告	<ol style="list-style-type: none"> <li>单击 <b>File &gt; Print &amp; Report Setup.</b></li> <li>在 <b>Report Template</b> 部分选择要使用的模板，然后单击 <b>OK.</b></li> </ol>
导出报告	<ol style="list-style-type: none"> <li>单击 <b>File &gt; Export.</b></li> <li>在 <b>File</b> 字段中键入文件名称。</li> <li>在 <b>Save as type</b> 列表中，选择文件类型。</li> <li>如果在 Quantitate 模式下导出报告，可从 <b>Export</b> 部分选择 <b>All Columns</b> 或 <b>Visible Columns</b>，然后单击 <b>Save.</b></li> </ol>

## 结果表

结果表可以根据校准曲线，将每一种未知样本中分析物的计算所得浓度进行汇总。其中还包括校准曲线以及结果统计数据。

将结果表中的数据导出为 txt 文件，以用于其他应用程序，如 Microsoft Excel。可以选择导出表中所有可能的数据，或者只导出可见列中的数据。

注释: 我们建议用户仅使用受控方法，如导出结果表和报告，从 Analyst MD 软件输出数据。输出数据的其他来源（如从结果表复制和粘贴）不受控制，不应使用。

结果表中的数据可以采用三种不同的方式来存储：

- 使用 **Sort** 按钮对表中的 1-3 列迅速排序。排序标准无法保存。
- 创建一个表专用排序，将排序标准与当前表一起保存。表专用排序能够对当前表中的 1-3 列排序，并保存该表所使用的排序标准。
- 使用以前创建的预设排序。创建并保存一个排序，供以后应用到结果表中。

提示! 要保存排序或任何其他表格设置，右键单击表格，然后单击 **Table Settings > Export To New Table Settings.**。排序和其他参数可用于当前的项目。要在不同的项目中使用表格设置，单击 **Tools > Project > Copy Data.** 以将设置复制到其他项目。选择 **Source Project Name** 和 **Target Project Name**，选择 Directories 下的 **Table Settings** 复选框，然后单击 **Copy**。如果将在新项目中使用 **Table Settings**，则必须先创建新项目，然后再复制 **Table Settings**。

## 查看结果表的具体布局

结果表的默认视图是 **Full Layout** 或 **Summary Layout**。如果每个样本有多种分析物，则可在 **Analyte Layout** 中查看每种分析物。

当 **Results Table** 打开并激活时，单击鼠标右键，然后单击下列字段之一：

表 6-12 结果表布局

字段	描述
<b>Full</b>	单击以查看 Full Layout。
<b>Summary</b>	单击字段名称。
<b>Analyte</b>	单击单个分析物以查看 Analyte Layout。查看 MRM 或 <i>Scheduled</i> MRM 算法结果时，用户可以单击 <b>Analyte</b> 以显示化合物 ID 的列表。
<b>Analyte Group</b>	单击分析物组以查看 Analyte Group Layout。  提示! 首先必须新建一个分析物组。若要这么做，可在 Results Table 中单击右键，然后单击 <b>Analyte Group &gt; New.</b>
<b>Sample Type</b>	单击以显示特定样本类型。

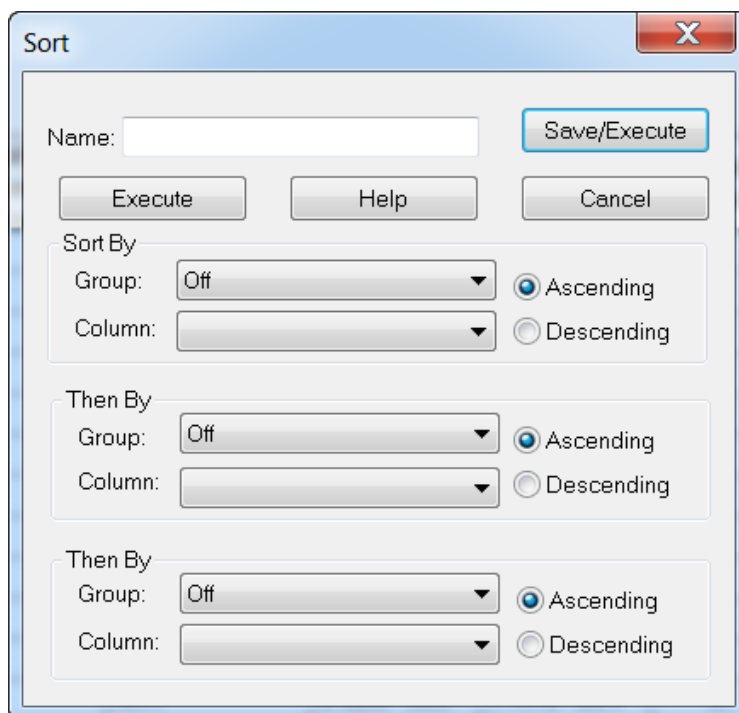
## 在结果表中排列数据

1. 在结果表中选择最多 3 列，按需要的顺序排列。
2. 执行以下操作之一：
  - 若要按升序排列，单击 **A-Z**。
  - 若要按降序排列，单击 **Z-A**。

## 对结果表排序并保存排序标准

1. 在结果表中单击右键，然后单击 **Sort > New**。

图 6-13 Sort 对话框

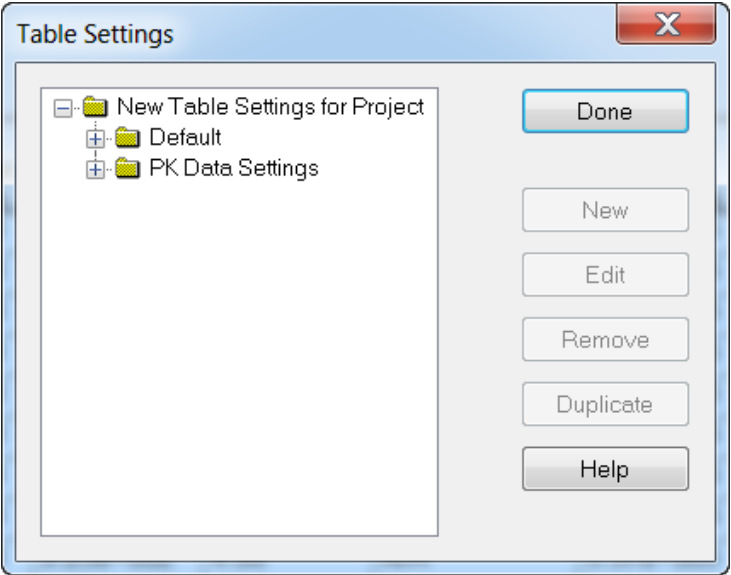


2. 在 **Name** 字段中，键入新排序的名称。
3. 对于每一条排序规则，在 **Sort By** 和 **Then By** 部分进行下列操作：
  - 在 **Group** 列表中，选择要排序的列类型。
  - 在 **Column** 列表中，选择要排序的列。
  - 选择排列的方向：**Ascending** 或 **Descending**。
4. 执行以下操作之一：
  - 若要进行排序、保存排序标准，并关闭 **Sort** 对话框，单击 **Save/Execute**。
  - 若要执行排序并关闭 **Sort** 对话框而不保存排序标准，单击 **Execute**。

## 保存默认排序标准供以后的结果表使用

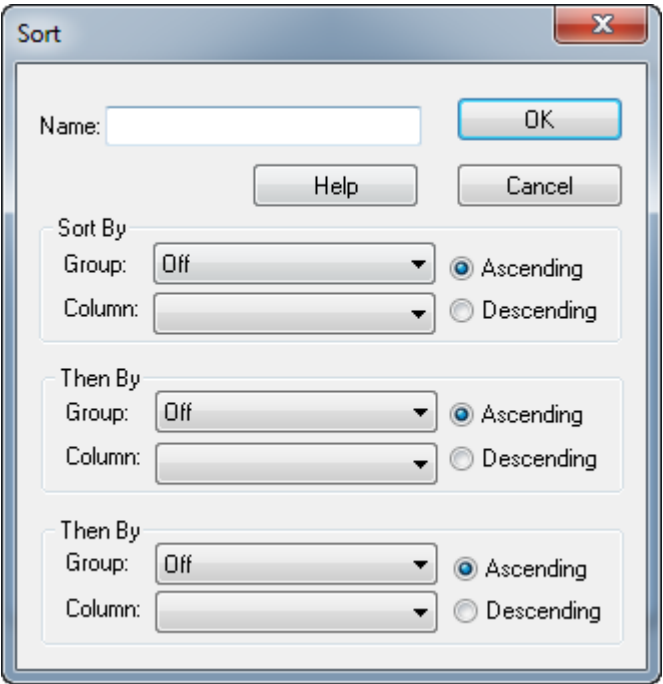
1. 单击 **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**。

图 6-14 Table Settings 对话框



2. 展开 **Table Settings** 文件夹，然后双击 **Default** 文件夹。
3. 在展开后的 **Default** 文件夹中选择 **Sorts** 文件夹。
4. 单击 **New**。

图 6-15 Sort 对话框



5. 在 **Name** 字段中键入一个名称。
6. 对于要设置的每一条排序规则，在 **Sort By** 部分中执行下列操作：

- a. 在 **Group** 列表中选择列类型。
  - b. 在 **Column** 列表中选择列。
  - c. 选择排列的方向：**Ascending** 或 **Descending**。
7. 若保存标准并关闭 **Sort** 对话框，单击 **OK**。
  8. 单击 **Done**。

## 用预设排序标准对结果表排序

在结果表中单击右键，单击 **Sort**，然后选择排序名称。

## 关于使用结果表查询

查询是指根据使用文本或算法选择标准所设置的一定条件，来索取结果表中的记录。在结果表生成的过程中或者生成之后应用查询。查询分为两类，即默认查询和表特定查询。请参阅以下章节：[默认查询](#)和[特定表查询](#)。

我们建议用户验证用来分析结果表中数据的任何查询。

## 比较批次之间的结果

对于要在 **Statistics** 窗口中合并的数据，分析物数量和分析物名称必须相同。

1. 打开一个 **Results Table**。
2. 单击 **Tools > Statistics**。
3. 执行以下任一操作：
  - 若要按 **Results Table** 排列结果，在 **Conc. as Rows** 列表中选择 **Group By Batch**。
  - 若要按浓度顺序排列结果，在 **Conc. as Rows** 列表中选择 **Group By Concentration**。
  - 若要按浓度顺序排列结果，但不包含显示每组或每个批次统计信息的行，在 **Conc. as Rows** 列表中选择 **Group By Concentration (no All)**。

该软件会对结果进行排序。在每个批次或组结束时，会显示额外的一或两行：**All**（此组的所有结果表的统计数据）和 **Average**（此批次或组统计数据的统计值）。

## 浓度水平对结果有何影响

浓度是针对所有 QC 和标准物设定的。如果浓度水平精度的变动幅度超过 **Create Default Query** 对话框中的 **Max. Variation** 字段的设定值，该信息就会在结果表中显示。

## 结果表布局

软件具有下列预定义的结果表视图。

- [Full Layout 视图](#)
- [Summary Layout 视图](#)
- [Analyte Layout 视图](#)

- [Analyte Group Layout 视图](#)
- [Sample Type Layout 视图](#)

在 Analyte Layout 视图中可显示来自多分析物样本的每种分析物。预设视图为 Full 视图。

## Full Layout 视图

预设的 Full Layout 视图可以显示定量批次中所有分析物的数据。所显示的列取决于在 Results Table Columns 对话框中选择的列，以及在 Quantitation Method Wizard 的第二页中选择的设置项。

图 6-16 样本的 Full Layout 视图

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration
1	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 1	2.45e+002	6.02e+001	0.00
2	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 2	1.25e+004	4.53e+003	0.00
3	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.80e+002	2.53e+002	0.00
4	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.39e+004	4.93e+003	0.00
5	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.55e+003	5.08e+002	0.00
6	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.28e+004	4.27e+003	0.00
7	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.32e+003	1.04e+003	0.00
8	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.14e+004	4.20e+003	0.00
9	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.12e+003	2.33e+003	0.00
10	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.23e+004	4.35e+003	0.00
11	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.50e+004	4.77e+003	0.00
12	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.34e+004	4.83e+003	0.00
13	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.70e+004	1.20e+004	0.00
14	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.51e+004	5.29e+003	0.00
15	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.73e+004	2.49e+004	0.00
16	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.50e+004	5.41e+003	0.00
17	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.61e+004	2.44e+004	0.00
18	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	8.04e+003	3.13e+003	0.00

## Summary Layout 视图

Summary Layout 视图中包含了锁定列以及其余列中每一种分析物的选定字段。例如，如果从菜单中选择了两种分析物的 Analyte Peak Area，则会显示这些分析物的 Sample Name 和 Analyte Peak Area 列。Summary Layout 视图中还包含了 Formula 和 Custom（如存在）。

图 6-17 样本的 **Summary Layout** 视图

	Sample Name	Peak 1	Peak 2
1	B series 0 blank	2.45e+002	1.25e+004
3	B series 0.1 ng/mL	7.80e+002	1.39e+004
5	B series 0.2 ng/mL	1.55e+003	1.28e+004
7	B series 0.5 ng/mL	3.32e+003	1.14e+004
9	B series 1.0 ng/mL	7.12e+003	1.23e+004
11	B series 2.0 ng/mL	1.50e+004	1.34e+004
13	B series 5.0 ng/mL	3.70e+004	1.51e+004
15	B series 10.0 ng/mL	7.73e+004	1.50e+004
17	B series 20.0 ng/mL	7.61e+004	8.04e+003
19	Unknown concentra	1.23e+004	8.39e+003
21	Unknown concentra	8.71e+003	5.71e+003
23	Unknown concentra	1.12e+004	7.18e+003
25	Unknown concentra	1.32e+004	7.36e+003
27	Unknown concentra	1.25e+004	7.14e+003
29	Unknown concentra	1.10e+004	6.50e+003
31	Unknown concentra	1.36e+004	7.94e+003

## Analyte Layout 视图

Analyte Layout 视图中包含了特定分析物的数据。所有其他分析物均隐藏。例如，如果选择了分析物 A，则会显示分析物 A 的所有数据。所显示的列取决于在 **Results Table Columns** 对话框中选择的列，以及在 **Quantitation Method Wizard** 的第二页中选择的设置项。

选择了峰 1 的 **Analyte Layout** 视图看上去可能与下图类似。在此视图中，每隔一行排除 **Full Layout** 视图中显示的内容。

图 6-18 样本的 **Analyte Layout** 视图

	Sample Name	File Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration	Use Record	Record Modified
1	B series 0 blank	QuanData.Wiff	2.45e+002	6.02e+001	0.00		<input type="checkbox"/>
3	B series 0.1 ng/mL	QuanData.Wiff	7.80e+002	2.53e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5	B series 0.2 ng/mL	QuanData.Wiff	1.55e+003	5.08e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
7	B series 0.5 ng/mL	QuanData.Wiff	3.32e+003	1.04e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9	B series 1.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.12e+003	2.33e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
11	B series 2.0 ng/mL	QuanData.Wiff	1.50e+004	4.77e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
13	B series 5.0 ng/mL	QuanData.Wiff	3.70e+004	1.20e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
15	B series 10.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.73e+004	2.49e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
17	B series 20.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.61e+004	2.44e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
19	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.23e+004	4.30e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
21	Unknown concentra	QuanData.Wiff	8.71e+003	2.53e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
23	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.12e+004	3.40e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
25	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.32e+004	4.24e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
27	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.25e+004	4.04e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
29	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.10e+004	3.96e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
31	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.36e+004	5.16e+003	N/A		<input type="checkbox"/>

## Analyte Group Layout 视图

Analyte Group Layout 视图中包含了属于某个特定组的分析物的数据。选择的如 **Results Table Columns** 对话框中的数据将在结果表中显示。请参阅下图。在结果表中显示 **Analyte Peak Name** 列以显示属于该组的分析物的名称。

图 6-19 样本的 **Analyte Group Layout** 视图

Formula: Analyte Group: Minoxidols Only  
Query: None  
Idle  
Sort : Unsorted

	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

**Sample Type Layout** 视图

Sample Type Layout 让用户能够按样本类型筛选结果表。

图 6-20 **Sample Type Layout** 视图

Sample Type: Standard  
Query: None  
Idle  
Sort : Unsorted

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)
1	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.63e+005
2	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.68e+005
3	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.31e+005
4	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.11e+005
5	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.58e+005
6	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.76e+005
7	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.72e+005
8	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.94e+005
9	STD 5	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.61e+005

结果表字段

向标准结果表中添加列，以显示 **Analyte**、**Internal Standard** 和 **Record** 字段的 **DAD**（二极管阵列检测器）数据。

方程式字段

方程式字段显示了由用户定义的电子表格样式的方程式结果。 **Formula** 字段位于结果表上方，当结果表中至少有一个 **Formula** 列的情况下才会显示。选中 **Formula** 列的单元格后，**Formula** 字段便被激活。选择 **Formula** 列后，**Formula** 字段下方的 **Delete Formula Column** 按钮也可以使用。



如果使用了公式列，我们建议用户对结果进行验证。

## 自定义字段

自定义字段中含有采集过程中所定义的信息。采集样本时，用户可以创建自定义列，并定义填入列中的数据类型。一旦自定义列成为结果表的一部分，就可以和其他列一样处理（如移动、隐藏、据此定义方程式）。

## 内标物列字段

结果表中的内标物列显示关于内标物分析之后的信息。下表显示了可用的字段。

表 6-13 内标物列

列	描述
<b>IS Peak Name</b>	内标物峰的名称。
<b>IS Units</b>	内标物的指定单位。
<b>IS Peak Area</b>	内标物峰的面积。
<b>IS Peak Height</b>	内标物峰的高度。
<b>IS Concentration</b>	内标物的已知浓度。它适用于内标物和质量对照样本类型。溶剂、空白样本和双空白样本类型显示为零。未知样本显示 <b>N/A</b> 。
<b>IS Retention Time</b>	色谱图保留时间，由软件确定。
<b>IS Expected Retention Time</b>	代表性样本的保留时间。从定量方法中获取。
<b>IS Retention Time Window</b>	定量方法中所指定的保留时间窗。
<b>IS Centroid Location</b>	经过强度加权的分析物平均保留时间。用于确定到该时间以及该时间后的峰面积。
<b>IS Start Scan</b>	与峰起点处的时段或实验组合相关的循环次数。
<b>IS Start Time</b>	与峰起点处的时段或实验组合相关的时间。
<b>IS Stop Scan</b>	与峰终点处的时段或实验组合相关的循环次数。
<b>IS Stop Time</b>	与峰终点处的时段或实验组合相关的时间。
<b>IS Integration Type</b>	用于发现基线并在找到峰的情况下计算积分的方法。其类型有手动和自动（ <b>Baseline-to-Baseline</b> 、 <b>Valley</b> 、 <b>Exponential Skim</b> 和 <b>Exponential Child</b> ）。
<b>IS Signal to Noise</b>	峰的信噪比。
<b>IS Peak Width</b>	峰高度与宽度之比。
<b>IS UV Range</b>	内标物的 UV（紫外线）范围。
<b>IS UV Channel</b>	内标物的 UV（紫外线）信道。

表 6-13 内标物列 (续)

列	描述
<b>IS Peak Width at 50 Percent (min.)</b>	(只读) 峰 50% 高度处的峰宽度。
<b>IS Baseline Slope (%/min.)</b>	(只读) 此列显示基线的斜率。
<b>IS Peak Asymmetry</b>	(只读) 此列显示下列方程式计算得出的峰不对称度: $\frac{[(\text{峰终止时间}) - (\text{保留时间})]}{[(\text{保留时间}) - (\text{峰开始时间})]}$ 该数值在 1.0 附近表示对称峰, 大于 1.0 表示拖尾峰, 小于 1.0 表示伸舌峰。
<b>IS Processing Alg</b>	(只读) 此列显示所使用的处理算法。
<b>IS Integration Quality</b>	<b>Integration Quality Index</b> 表示峰积分的效果好坏。该值接近 1 表示积分峰的效果较好, 接近 0 表示积分峰的效果较差。

## 记录字段

结果表中的 **Record** 列包含了每一种样本记录的其他信息 (仅适用于分析物的信息, 内标物不适用)。下表显示了可用的字段。

表 6-14 记录列

列	描述
<b>Use Record</b>	指校准中是否包含该记录。适用于标准物和 QC 样本。如果清空该复选框, 未被使用的标准物和 QC 样本将从 <b>Statistics Table</b> 中剔除。
<b>Record Modified</b>	指用于记录的原定量方法是否有任何修改。
<b>Calculated Concentration</b>	使用校准曲线计算得出的分析物的计算所得浓度。
<b>Relative Retention Time</b>	内标物与分析物的保留时间之比。
<b>Accuracy</b>	计算所得浓度除以未知物的浓度 (以百分比表示)。
<b>Response Factor</b>	峰的面积或高度 (取决于回归选项) 除以分析物的浓度。

## 分析物列

结果表中的分析物列包含每种分析物和内标物 (如有使用) 经过分析后的信息。下表显示了可用的字段。

表 6-15 结果表：分析物列

列	描述
<b>Analyte Peak Name</b>	分析物的名称。
<b>Analyte Units</b>	分析物浓度的指定单位。
<b>Analyte Peak Area</b>	分析物的面积。
<b>Analyte Peak Height</b>	分析物峰的高度。
<b>Analyte Concentration</b>	分析物的实际已知浓度。它适用于内标物和质量对照样本类型。溶剂、空白样本和双空白样本类型显示为零。未知样本显示 N/A（无）。
<b>Analyte Retention Time</b>	软件所确定的色谱图保留时间。
<b>Analyte Expected Retention Time</b>	代表性样本的保留时间，取自于定量方法。
<b>Analyte Retention Time Window</b>	定量方法中所指定的保留时间窗。
<b>Analyte Centroid Location</b>	经过强度加权的分析物平均保留时间。用于确定到该时间以及该时间后的峰面积。
<b>Analyte Start Scan</b>	与峰起点处的时段或实验组合相关的循环次数。
<b>Analyte Start Time</b>	与峰起点处的时段或实验组合相关的时间。
<b>Analyte Stop Scan</b>	与峰终点处的时段或实验组合相关的循环次数。
<b>Analyte Stop Time</b>	与峰终点处的时段或实验组合相关的时间。
<b>Analyte Integration Type</b>	用于发现基线并在找到峰的情况下计算积分的方法。其类型有手动和自动（Baseline-to-Baseline、Valley、Exponential Skim 和 Exponential Child）。
<b>Analyte Signal to Noise</b>	峰与基线相比的信噪比。
<b>Analyte Peak Width</b>	峰高度与宽度之比。
<b>Analyte UV Range</b>	分析物的 UV 范围。

表 6-15 结果表：分析物列 (续)

列	描述
<b>Analyte UV Channel</b>	分析物的 UV 信道。
<b>Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)</b>	(只读) 此列显示峰 50% 高度处的峰宽度。
<b>Analyte Baseline Slope (%/min.)</b>	(只读) 此列显示基线的斜率。
<b>Analyte Peak Asymmetry</b>	(只读) 此列显示下列方程式计算得出的峰不对称度： $[(\text{峰终止时间}) - (\text{保留时间})] / [(\text{保留时间}) - (\text{峰开始时间})]$ 该数值在 1.0 附近表示对称峰，大于 1.0 表示拖尾峰，小于 1.0 表示伸舌峰。
<b>Analyte Processing Alg</b>	该列为只读列，显示所使用的处理算法。
<b>Analyte Integration Quality</b>	Integration Quality 指数表示峰积分的效果好坏。该值接近 1 表示积分峰的效果较好，接近 0 表示积分峰的效果较差。它有利于对峰的检查，因为用户可以看到 Analyte Integration Quality 值较低的峰，以便进行手动检查。此外，用户还可以查询 Analyte Integration Quality 值小于某个可接受值的数据，以显示数据子集，并进行手动检查。

## 样本列

结果表中的样本列显示所有分析物通用的样本信息。不同实验室对空白和双空白样本有不同的定义。下表显示了可用的字段。

表 6-16 样本列

列	描述
<b>Sample Name</b>	用户在采集样本时给样本指定的名称。
<b>Sample ID</b>	用户定义的样本标识。

表 6-16 样本列 (续)

列	描述
<b>Sample Type</b>	<p>一个样本内的所有分析物必须为相同的样本类型。显示的样本类型为以下当中的一个：</p> <p><b>Unknown:</b> 包含浓度待确定的分析物。</p> <p><b>Standard:</b> 分析物浓度已知的样本。用于校准用途。</p> <p><b>Quality Control:</b> 分析物浓度已知的样本。用于检查标准物曲线的准确性。</p> <p><b>Solvent:</b> 确认质谱仪洁净。在整个样本制备过程中没有使用溶剂。</p> <p><b>Blank:</b> 回归中未使用的浓度为零的样本。</p> <p><b>Double Blank:</b> 制备中没有加入内标物或样本分析物的样本。确认提取过程中没有添加任何物质。</p>
<b>Sample Comment</b>	描述样本的评注。
<b>Set Number</b>	用于标识整个批次子集的编号。
<b>Acquisition Method</b>	用于采集样本的采集方法名称。
<b>Acquisition Date</b>	运行采集的日期和时间。
<b>Rack Type</b>	与所使用的自动进样器支架（如有使用）相关的标识。
<b>Rack Number</b>	采集样本时放置样本的支架位置。（在单支架自动进样器中，该值始终为1。）
<b>Vial Position</b>	自动进样器孔板中进样瓶所在的位置。
<b>Plate Type</b>	所使用的孔板类型的标识（仅限多孔板支架）。
<b>Plate Number</b>	支架上的孔板位置（仅限多孔板支架）。
<b>File Name</b>	原始数据文件的名称。因为来自众多样本的数据可能包含在一个数据文件中，该名称不是一一对应的。
<b>Dilution Factor</b>	用来稀释样本的稀释剂数量。用于确定计算所得浓度。
<b>Sample Annotation</b>	描述样本的其他评注。
<b>Weight-to-Volume Ratio</b>	样本的重量体积比。

表 6-17 DAD 列

列	描述
<b>Analyte Peak Area for DAD</b>	分析物峰的面积 (mAU/分钟)。
<b>Analyte Peak Height for DAD</b>	分析物峰的高度 (mAu)。
<b>Analyte Wavelength Ranges</b>	波长范围 (nm)。
<b>IS Peak Area for DAD</b>	内标物峰的面积 (mAU/分钟)。
<b>IS Wavelength Ranges</b>	波长范围 (nm)。
<b>IS Peak Height for DAD</b>	内标物峰的高度 (mAU) 计算的 DAD 浓度。

下表显示的是可以添加到结果表中的字段，用于 ADC（模数转换器）搜集的数据。

表 6-18 ADC 列

列	描述
<b>Analyte Channel</b>	采集分析物的 ADC 信道。
<b>Analyte Wavelength Ranges</b>	波长范围 (nm)。
<b>IS Channel</b>	采集内标物的 ADC 信道。
<b>IS Wavelength Ranges</b>	波长范围 (nm)。

## 结果表提示

目的	方法
表专用查询：再次查看整个表	在结果表中的任意位置单击右键，然后单击 <b>Query &gt; Show All</b> 。用户可以再次应用或编辑该查询。
检查校准曲线	在曲线中的任意位置单击右键，然后单击 <b>Active Plot</b> ，选择待绘制在上方的曲线。
样本统计数据检查：检查单个峰	选择 <b>Display the Data Set(s)</b> 复选框，然后在 <b>Data Point</b> 列中双击代表峰的数据点。软件将显示带有用户所选峰的 <b>Peak Review</b> 窗口。

---

目的	方法
结果表：使结果表回到原来的顺序	在结果表中单击右键，然后单击 <b>Sort &gt; Sort By Index</b> 。

图标	名称	功能
	Background Subtract	在选择背景范围后执行背景减除。
	Subtract Range Locked	锁定选定背景范围。用户可以独立移动每一个未锁定的背景范围。
	Centroid	计算数据棒状图。
	Home Graph	使图形恢复原始尺寸。
	Overlay	叠加图形。
	Cycle Overlays	在叠加图形之间循环。
	Sum Overlays	将图形添加在一起。
	Show Fragment Interpretation Tool	打开 <b>Fragment Interpretation</b> 工具，该工具会自动从 .mol 文件计算非环单键裂解碎片。
	Smooth	用平滑算法平滑数据。
	Gaussian Smooth	用高斯平滑算法平滑数据。



# PPG 精确质量表

# B

下表列出了用 PPG（聚丙烯乙二醇）校准溶液观察到的准确的单同位素质量和带电离子（正电和负电）。这些质量和离子是采用方程式  $M = H[OC_3H_6]_nOH$  计算的，而正离子 MS/MS 碎片则使用方程式  $[OC_3H_6]_n(H^+)$ 。在所有计算中， $H = 1.007825$ ， $O = 15.99491$ ， $C = 12.00000$ ， $N = 14.00307$ 。

注释: 用 PPG 溶液进行校准时，一定要使用正确的同位素峰。

表 B-1 PPG 精确质量

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
1	76.052	94.087	59.0	56.061	121.050
2	134.094	152.129	117.1	85.082	179.092
3	192.136	210.171	175.1	114.102	237.134
4	250.178	268.212	233.2	143.123	295.176
5	308.220	326.254	291.2	172.144	353.218
6	366.262	384.296	349.2	201.165	411.259
7	424.304	442.338	407.3	230.186	469.301
8	482.346	500.380	465.3	259.207	527.343
9	540.388	558.422	523.4	288.228	585.385
10	598.430	616.464	581.4	317.249	643.427
11	656.471	674.506	639.4	346.270	701.469

## PPG 精确质量表

表 B-1 PPG 精确质量 (续)

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
12	714.513	732.548	697.5	375.291	759.511
13	772.555	790.590	755.5	404.312	817.552
14	830.597	848.631	813.6	433.333	875.594
15	888.639	906.673	871.6	462.354	933.636
16	946.681	964.715	929.7	491.373	991.678
17	1004.723	1022.757	987.7	520.396	1049.720
18	1062.765	1080.799	1045.7	549.417	1107.762
19	1120.807	1138.841	1103.8	578.438	1165.804
20	1178.849	1196.883	1161.8	607.459	1223.845
21	1236.890	1254.925	1219.9	636.480	1281.887
22	1294.932	1312.967	1277.9	665.501	1339.929
23	1352.974	1371.009	1335.9	694.521	1397.971
24	1411.016	1429.050	1394.0	723.542	1456.013
25	1469.058	1487.092	1452.0	752.563	1514.055
26	1527.100	1545.134	1510.1	781.584	1572.097
27	1585.142	1603.176	1568.1	810.605	1630.138
28	1643.184	1661.218	1626.2	839.626	1688.180

表 B-1 PPG 精确质量 (续)

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
29	1701.226	1719.260	1684.2	868.647	1746.222
30	1759.268	1777.302	1742.2	897.668	1804.264
31	1817.309	1835.344	1800.3	926.689	1862.306
32	1875.351	1893.386	1858.3	955.710	1920.348
33	1933.393	1951.428	1916.4	984.731	1978.390
34	1991.435	2009.469	1974.4	1013.752	2036.431
35	2049.477	2067.511	2032.5	1042.773	2094.473
36	2107.519	2125.553	2090.5	1071.794	2152.515
37	2165.561	2183.595	2148.5	1100.815	2210.557
38	2223.603	2241.637	2206.6	1129.836	2268.599
39	2281.645	2299.679	2264.6	1158.857	2326.641
40	2339.687	2357.721	2322.7	1187.878	2384.683
41	2397.728	2415.783	2380.7	1216.899	2442.724
42	2455.770	2473.805	2438.7	1245.920	2500.766
43	2513.812	2531.847	2496.8	1274.940	2558.808
44	2571.854	2589.888	2554.8	1303.961	2616.850
45	2629.896	2647.930	2612.9	1332.982	2674.892

## PPG 精确质量表

表 B-1 PPG 精确质量 (续)

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
46	2687.938	2705.972	2670.9	1362.003	2732.934
47	2745.980	2764.014	2729.0	1391.024	2790.976
48	2804.022	2822.056	2787.0	1420.045	2849.017
49	2862.064	2880.098	2845.0	1449.066	2907.059
50	2920.106	2938.140	2903.1	1478.087	2965.101
51	2978.147	2996.182	2961.1	1507.108	3023.143
52	3036.189	3054.224	3019.2	1536.129	3081.185
53	3094.231	3112.266	3077.2	1565.150	3139.227
54	3152.273	3170.307	3135.2	1594.171	3197.269
55	3210.315	3228.349	3193.3	1623.192	3255.311
56	3268.357	3286.391	3251.3	1652.213	3313.352
57	3326.399	3344.433	3309.4	1681.234	3371.394
58	3384.441	3402.475	3367.4	1710.255	3429.436
59	3442.483	3460.517	3425.5	1739.276	3487.478
60	3500.525	3518.559	3483.5	1768.297	3545.5202
61	3558.566	3576.601	3541.5	1797.318	3603.562
62	3616.608	3634.643	3599.6	1826.339	3661.604

表 B-1 PPG 精确质量 (续)

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
63	3674.650	3692.685	3657.6	1855.359	3719.645
64	3732.692	3750.726	3715.7	1884.380	3777.687
65	3790.734	3808.768	3773.7	1913.401	3835.729
66	3848.776	3866.810	3831.7	1942.422	3893.771
67	3906.818	3924.852	3889.8	1971.443	3951.813
68	3964.860	3982.894	3947.8	2000.464	4009.855
69	4022.902	4040.936	4005.9	2029.485	4067.897
70	4080.944	4098.978	4063.9	2058.506	4125.938
71	4138.985	4157.020	4122.0	2087.527	4183.980
72	4197.027	4215.062	4180.0	2116.548	4242.022
73	4255.069	4273.104	4238.0	2145.569	4300.064
74	4313.111	4331.145	4296.1	2174.590	4358.106
75	4371.153	4389.187	4354.1	2203.611	4416.148
76	4429.195	4447.229	4412.2	2232.632	4474.190
77	4487.237	4505.271	4470.2	2261.653	4532.231
78	4545.279	4563.313	4528.3	2290.674	4590.273
79	4603.321	4621.355	4586.3	2319.695	4648.315

## PPG 精确质量表

---

表 B-1 PPG 精确质量 (续)

n	精确质量 (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/MS 碎片	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
80	4661.363	4679.397	4644.3	2348.716	4706.357
81	4719.404	4737.439	4702.4	2377.737	4764.399
82	4777.446	4795.481	4760.4	2406.758	4822.441

# 联系我们

---

## 客户培训

- 北美地区: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- 欧洲: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- 在欧盟与北美之外请访问 [sciex.com/education](https://sciex.com/education)

## 在线学习中心

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX 支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。详情请访问 SCIEX 网站 [sciex.com](https://sciex.com) 或通过下述方式之一联系我们:

- [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

## 网络安全

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南, 请访问 [sciex.com/productsecurity](https://sciex.com/productsecurity)。

## 文档

本版本的文档取代本文档的所有先前版本。

要查看本文档的电子版本, 需要 Adobe Acrobat Reader。要下载最新版本, 请转到 <https://get.adobe.com/reader>。

要查找软件产品文档, 请参阅软件随附的版本发布说明或软件安装指南。

要查找硬件产品文档, 请参阅系统或组件随附的客户参考 DVD。

---

注释: 如需免费获取本文档的印刷版本, 请联系 [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)。

---