

Agilent 7890 / 7000 –GC/MS

MassHunter 工作站现场培训教材

(数据分析部分)



安捷伦科技有限公司
生命科学与化学分析仪器部

第一篇 定性分析

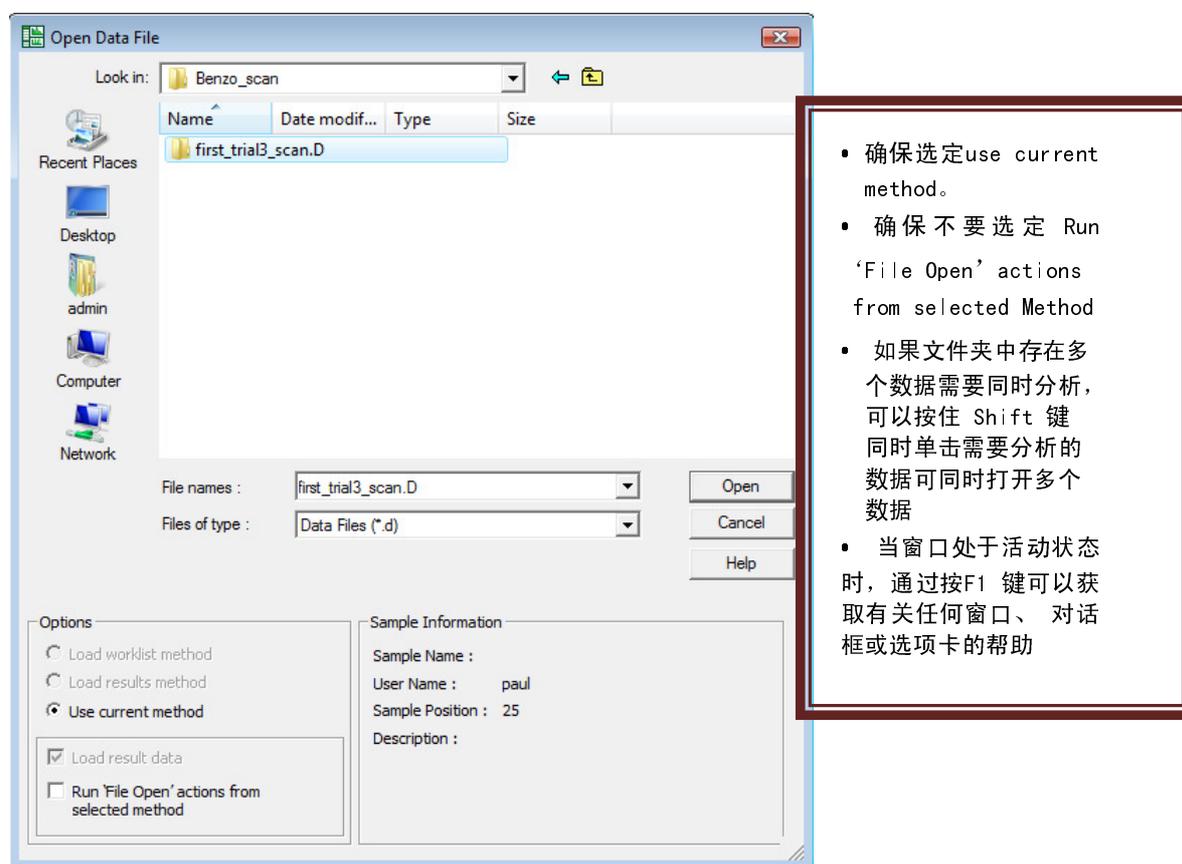
培训目的

熟悉安捷伦 MassHunter 工作站，了解其主要界面及相关功能；
能够正确使用该软件完成一次典型的定性分析并打印出定性报告。

练习 1 了解定性分析的基本知识

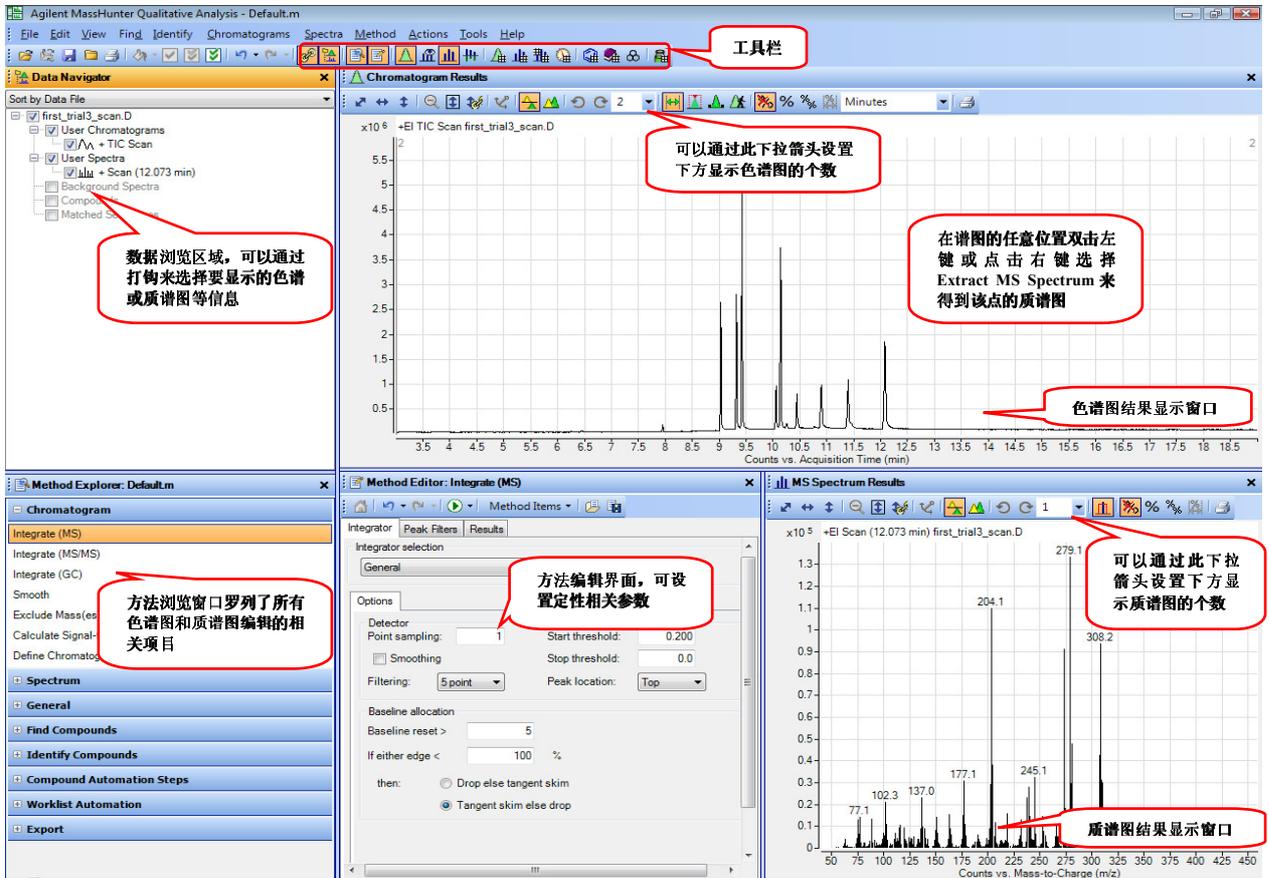
打开软件之前先将数据采集软件光盘 X:\Manuals\Benzodiazepine\DATA 目录下的所有文件夹拷贝到 D:\MassHunter\Data\目录下。此文件夹将包含我们练习所要使用的所有数据。

- 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 D:\MassHunter\Data \Benzo_scan 打开一个全扫描的文件 frist_trial3_scan.D。



下面我们先来熟悉一下 MassHunter 定性分析软件的主要界面及各个功能区的使用方法。

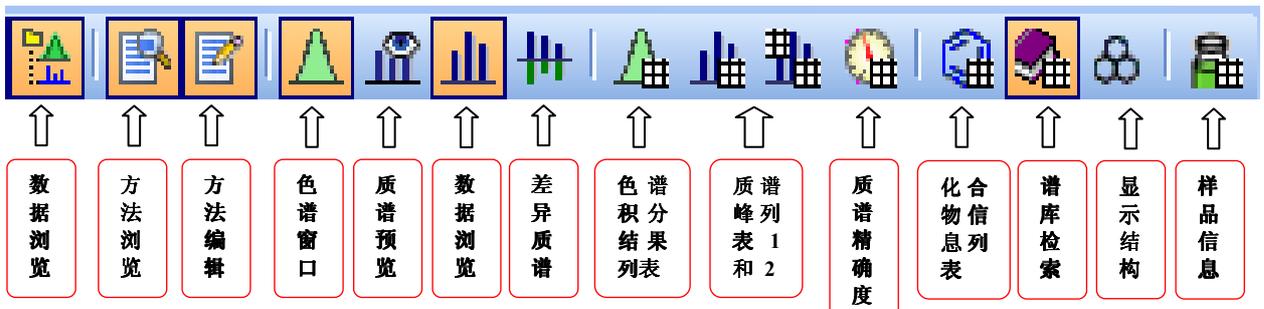
以下为主要功能区简介，详细使用方法会陆续在后面的教程中讲到：



个性化的窗口排列方式可以保存和调用，并且可以方便的恢复到默认的窗口排列方式。

- 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View > Windows Layout > Save Layout。
- 要恢复到默认布局，请单击View > Windows Layout > Restore Default Layout。

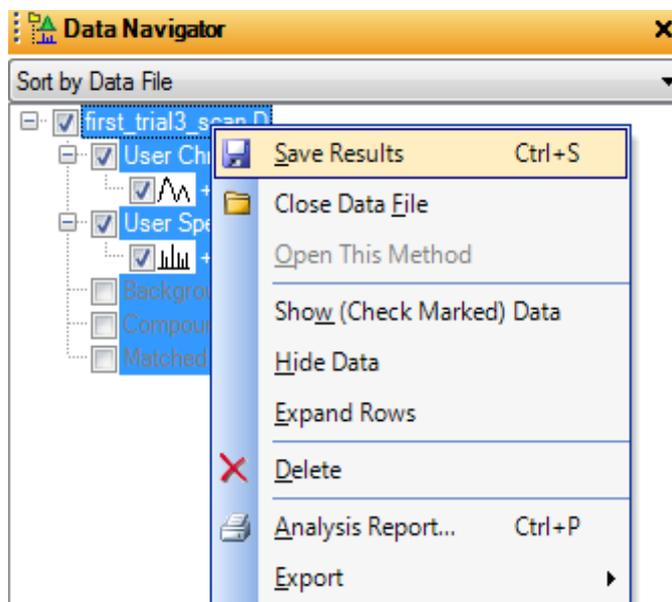
1.1.1 工具栏



1.1.2 数据文件浏览

如果数据文件调用后做了相关修改，可保存修改的结果。当再次调用此文件时，可调出上次保存的结果。

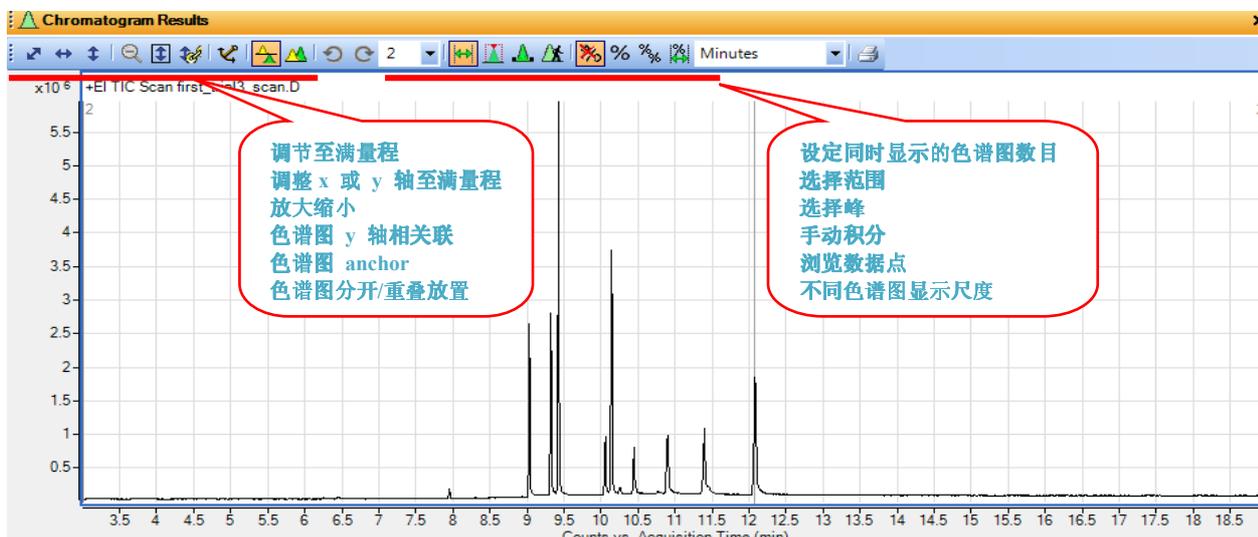
- 数据浏览界面显示所有调出的数据文件
- 可以选定/取消选定某个文件或某张图的对话框，有选择的显示数据文件与相关谱图
- 对数据文件单击右键，可选择关闭文件，保存修改结果或打印报告
- Sort by Data file/ Type 当调用多个数据时，可以选择数据排列顺序。



1.1.3 色谱图窗口

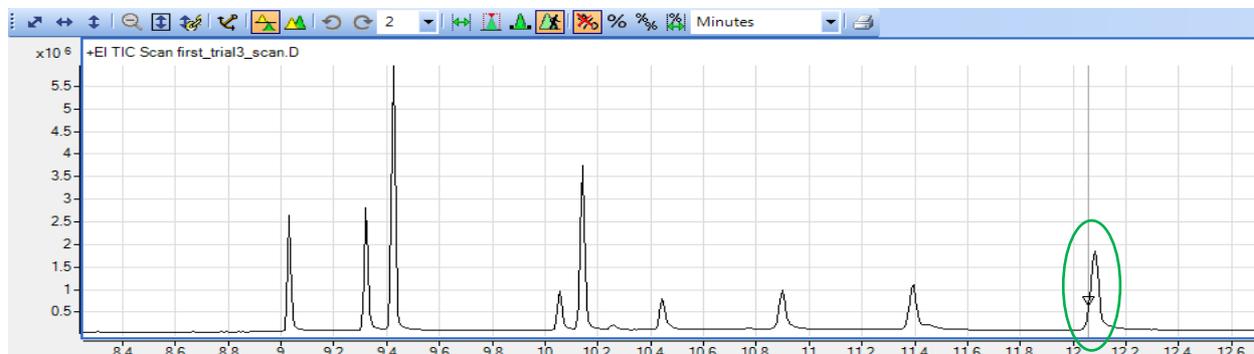
按住鼠标右键拉出一个矩形，可以放大选定谱图。点击工具栏图标  可恢复满量程显示。

- 要放大 X 轴，请将光标移到 X 轴值，直到出现水平双箭头。
- 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。
- 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。
- 单击对 X 轴自动定标图标  完全缩小 X 轴。
- 要放大 Y 轴，请将光标移到 Y 轴值，直到出现垂直双箭头。
- 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。
- 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。
- 单击对 Y 轴自动定标图标  完全缩小 Y 轴。



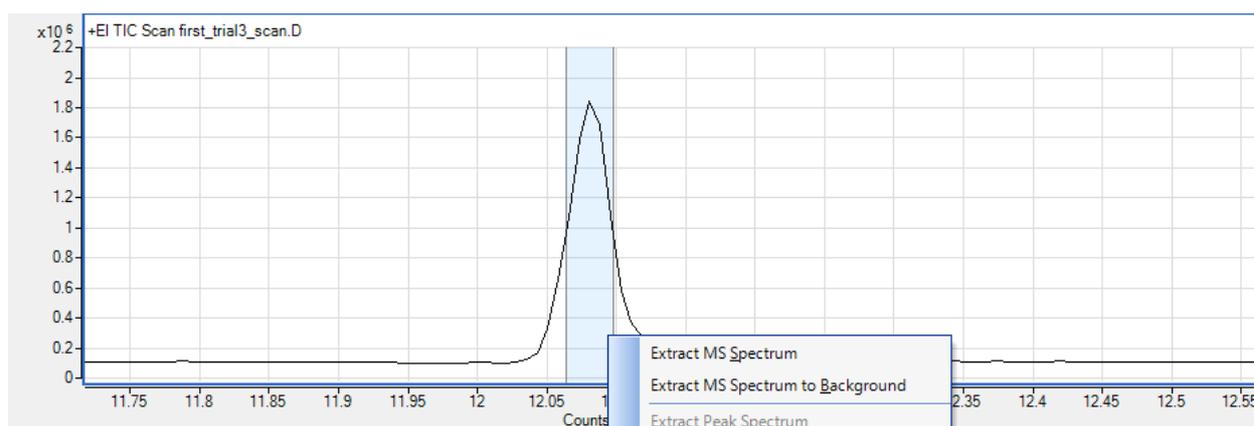
1.1.4 浏览数据点

激活 walk chromatogram  按键，点击色谱图即会在 spectrum preview 窗口显示这个点的质谱图。也可以利用键盘的左右键来查看各个数据点的质谱图。这个窗口的质谱图只是预览状态，不会保存为结果质谱图。如果需要保存，对谱图右击，选择 copy to User Spectra，则这张质谱图会复制到 spectrum results 窗口，并在左侧的数据浏览界面（Data Navigator）user spectrum 条目下有显示。



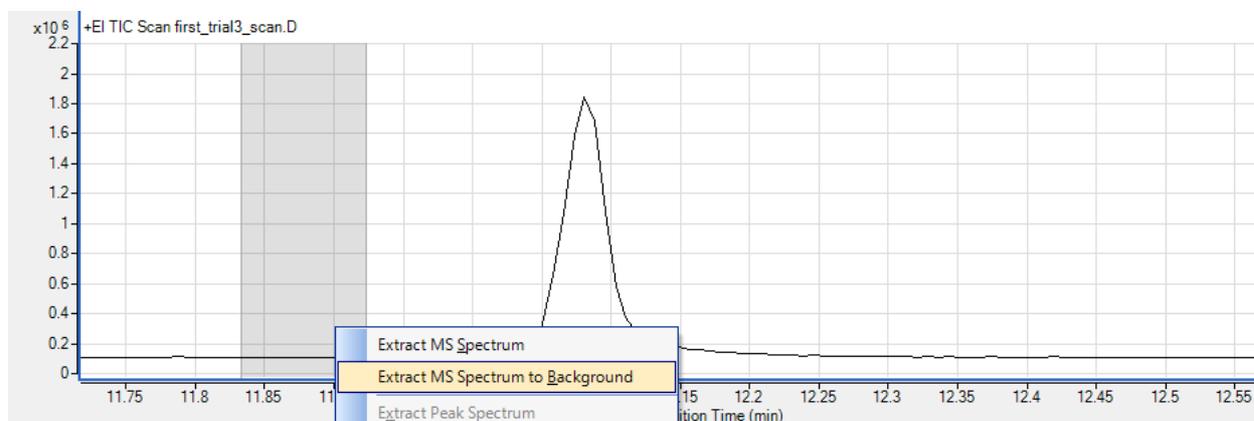
1.1.5 获得质谱图

激活 Range Select  按键，选择一个峰，从半峰宽选取一个范围，然后在所选择的范围点击右键，点击提取质谱图（Extract MS Spectrum）或者双击左键即可生成某一时间段的平均质谱图（如果需要特定点的质谱图，只要在谱图的该点位置双击左键或单击右键选择 Extract MS Spectrum 即可）。

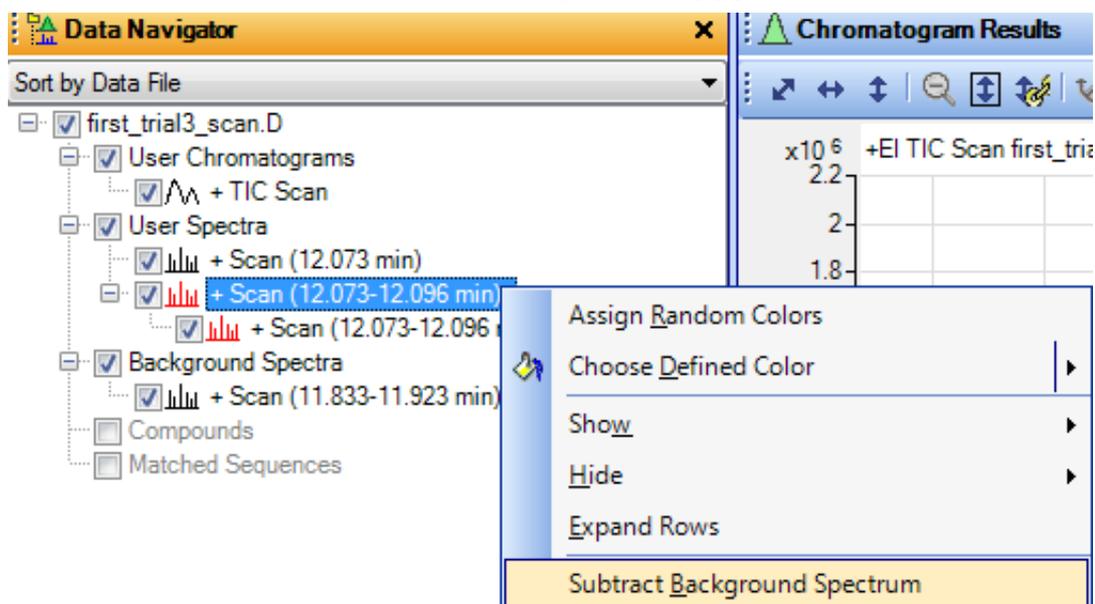


1.1.6 质谱图扣背景

生成当前背景质谱图：先选择合适的基线范围，然后点击右键选择 Extract Spectrum to Background 即将这段时间的质谱图设为当前背景质谱图。



生成了质谱图及背景质谱图后，在要分析的质谱图上点击右键，选择 Subtract Background Spectrum 即可得到手动扣除背景后的质谱图。扣除背景的质谱图数据后面会有 Sub 标识。



1.1.7 方法编辑窗口

对谱图点击右键，可进行积分，生成质谱图，计算信噪比等各项操作，但具体参数的编辑是在方法浏览窗口进行的。

方法浏览栏中的参数可以保存在定性分析方法中（DA Method）。

方法浏览窗口罗列了所有色谱图和质谱图编辑的相关项目：

Chromatogram:
 积分 Integrate
 平滑 Smooth
 过滤质量数 Excluded Mass
 计算信噪比 Calculate Signal-to-Noise
 生成色谱图 Define Chromatogram

Spectrum:
 提取质谱图 Extract (MS)
 提取二级质谱图 Extract (MS/MS)

General:
 分析报告 Analysis Report
 化合物报告 Compound Report
 通用报告选项 Common Report Options
 文件打开任务 File Open Actions
 提取数据格式 Extraction Data Format

Find Compound:
 通过解卷积寻找化合物 Find by Chromatogram Deconvolution

Identify Compound:
 谱库检索 Search Unit Mass Library

Compound Automation Steps:
 结果选项 Result Options
 寻找及定性 Find and Identify
 化合物报告 Compound Report

Worklist Automation:
 报告选项 Reporting Options
 工作列表任务 Worklist Actions
 工作任务适用范围 Selected Ranges

1.2 全扫描数据的定性分析

下面就开始选择数据 frist_trial3_scan.D 来熟悉一下如何对一个全扫描数据进行定性分析：

1.2.1 积分

- 打开和选择数据文件 frist_trial3_scan.D
- 选择方法浏览中的色谱图菜单中，根据数据类型选择积分项目
- 进行积分（绿色箭头）
- 如果有必要可对色谱图进行平滑

Method Editor: Smooth Chromatogram

Smoothing function: Gaussian

Function width: 15 points

Gaussian width: 5.000 points

根据谱图情况，进行适度平滑消掉毛刺。
注意不要过度平滑。

- 积分后的色谱峰有填充颜色，并标示了保留时间
- 在数据浏览栏选择 TIC Scan，然后点击  图标显示积分列表，并且可以通过在积分表点击右键来添加/删除积分列表的列或将积分列表导出为 Excel 格式。

Agilent MassHunter Qualitative Analysis - Default.m

Chromatogram Results

Peak	RT	Area	Area%
1	7.953	143331	2.21
2	9.028	2479696	38.29
3	9.321	2800679	43.25
4	9.427	6476250	100
5	10.058	1107059	17.09
6	10.141	4327782	66.83
7	10.261	152208	2.35
8	10.442	1102328	17.02
9	10.773	71787	1.11
10	10.9	1612902	24.9
11	11.397	1664477	25.7
12	12.081	3994697	61.68

Method Editor: Integrate (MS)

Integrator selection: General

Options:

- Detector: Point sampling: 1 Start threshold: 0.200
- Smoothing: Stop threshold: 0.0
- Filtering: 5 point Peak location: Top

Baseline allocation:

- Baseline reset > 5
- If either edge < 100 %
- then: Drop else tangent skim Tangent skim else drop

MS Spectrum Results

Mass Spectrum for peak at 12.073 min. Major peaks at m/z 204.1, 279.1, 308.2.

1.2.1.1 积分参数

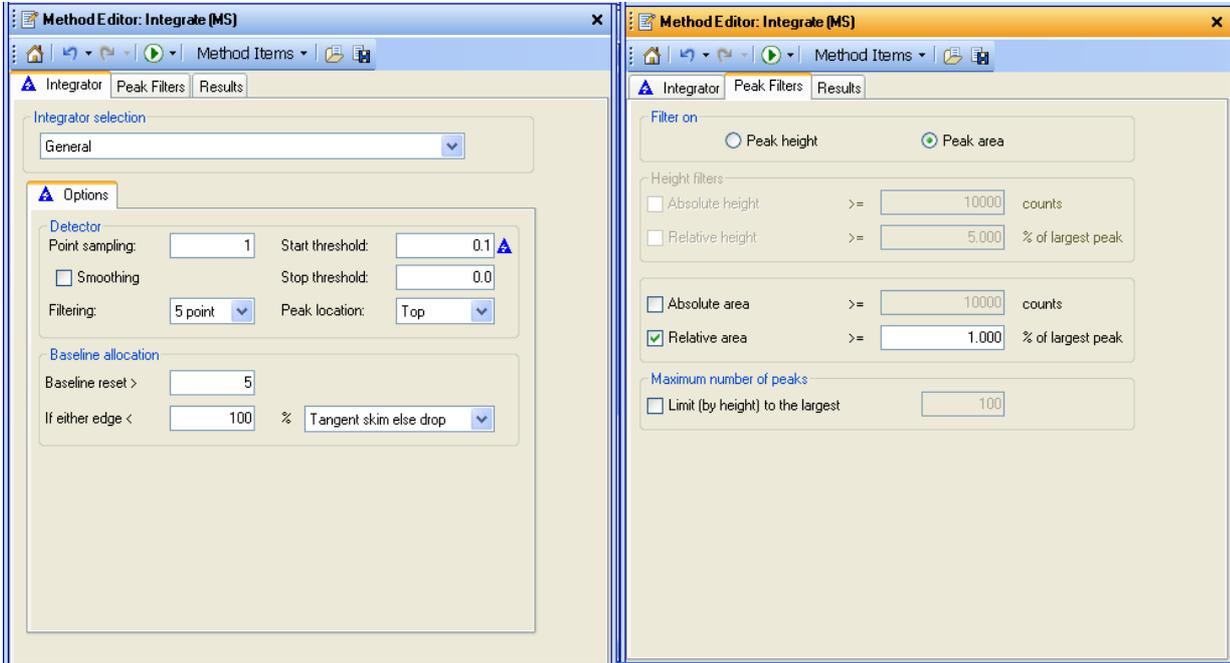
设置积分参数，可以拒绝小杂质峰的积分

无论是MS 积分器，还是MS/MS 积分器，都可以在 peak filter 菜单设置积分的阈值。

Area filter 峰面积阈值

Absolute area 绝对阈值

Relative area 相对阈值（相对于面积最大的峰）

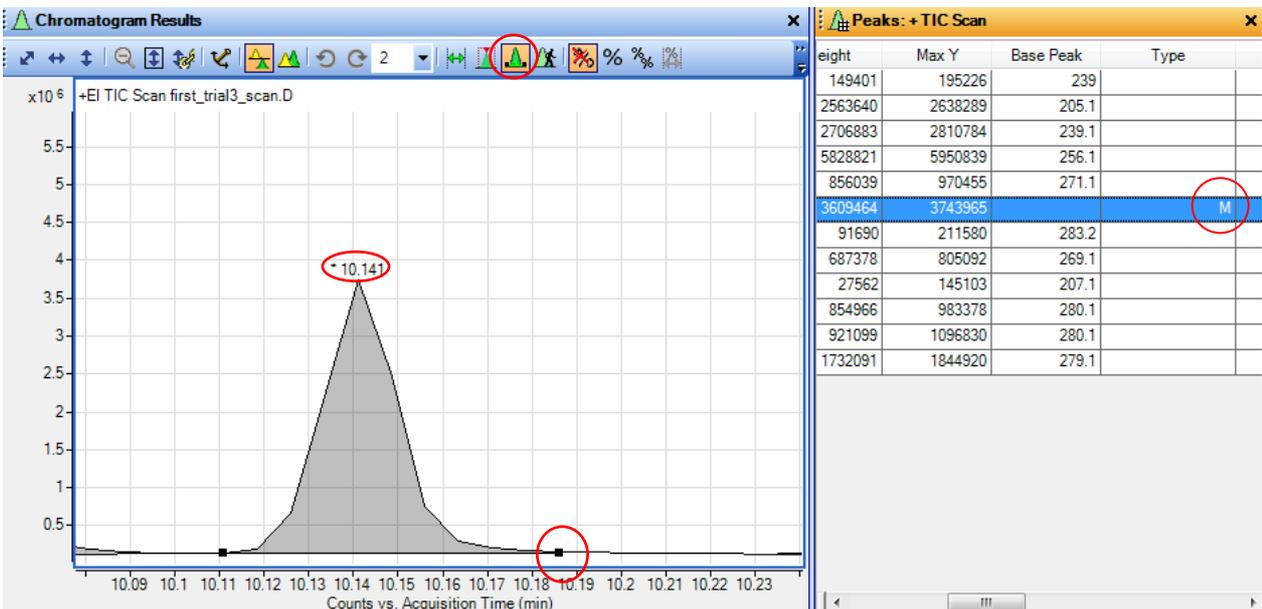


1.2.1.2 手动积分



如果对积分结果不满意，可以手动修改积分

激活手动积分按钮 ，对想修改的色谱峰点击左键，可看到该峰的积分线。左键拖动积分线的起止点到合适的位置，即完成手动积分的修改。手动修改过积分的色谱峰，峰顶用小星号(*)标识。并且在积分表(peak list)中，积分类型有“M”标识。



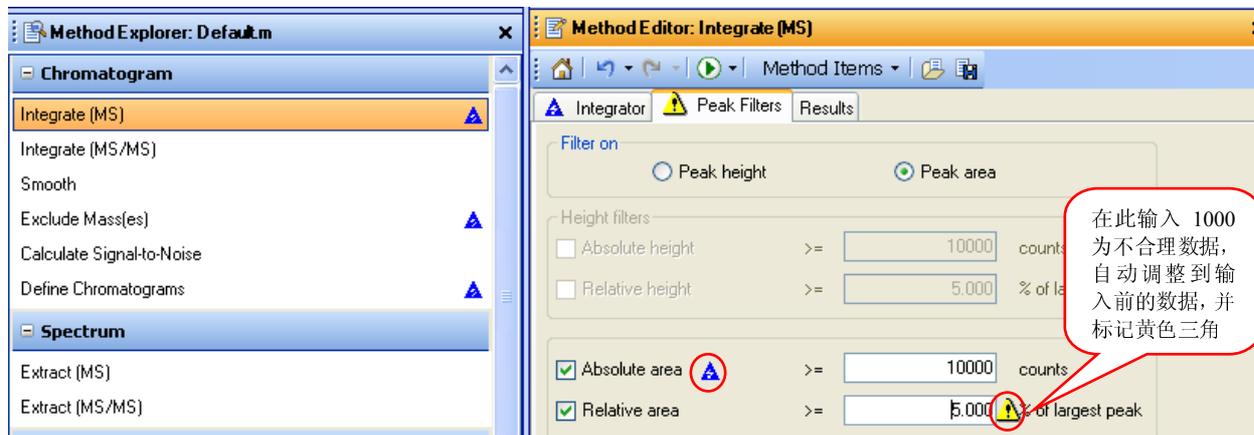
1.2.1.3 更改和提示标记

修改过的参数会被蓝色三角标记 。另外，所有其他会影响到的功能也会被标记。保存方法后，标记消失。

输入的参数如果超过允许范围，会被黄色三角标记 。仍显示为修改前的数值。

出现错误矛盾信息 

这些标记在优化数据分析参数时，非常好用。



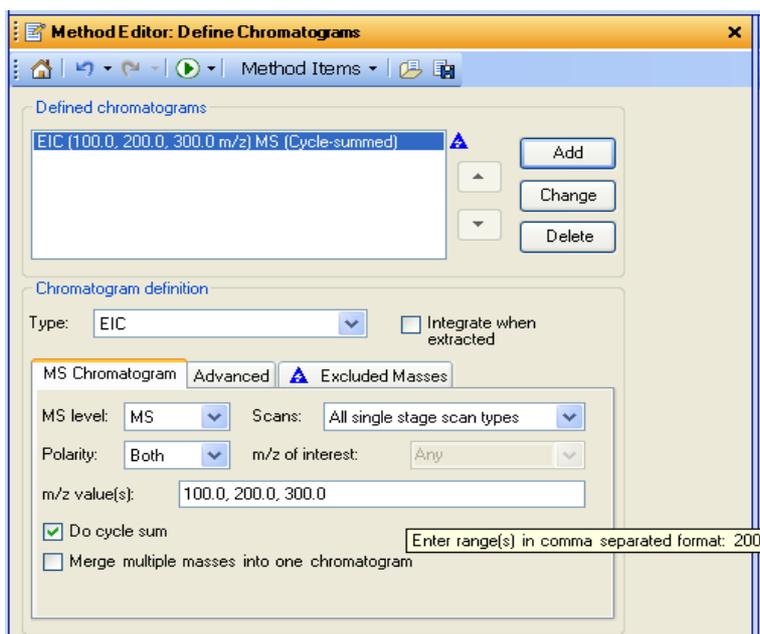
1.2.2 定义色谱图

方法编辑器中，编辑定义色谱图，可以生成 EIC（提取离子色谱图），BPC（基峰色谱图）等。在定义色谱图菜单中的谱图规定，是保存在方法中，还可以应用于其他数据。

1.2.2.1 生成 EIC

对于全扫描的数据，生成 EIC 时需要输入质量数。注意提取多个质量数离子的 EIC 时，质量数间用逗号间隔。（快捷方式：可以通过双击质谱图中某个质量数的棒棒图得到该质量数的提取色谱图）

Merge multiple masses into one chromatogram 合并不同质量数到同一色谱图。默认不激活该功能，即不同质量数分别提取 EIC。激活该功能，则会将不同质量数合并提取 EIC。



- 1 方法编辑器中选择 define chromatogram
- 2 在 Type 中选择 EIC
- 3 根据数据类型选择质谱级别 (MS level)，扫描类型 (Scans) 和极性 (Polarity)
- 4 输入质量数 (m/z value)，多个质量数可用逗号间隔
- 5 点击 Add 添加色谱图，并点击运行箭头

1.2.3 计算信噪比

选择 Calculate Signal to Noise 在方法编辑器中设置好了噪音范围和信噪比类型等，对谱图单击右键选择计算信噪比即可。对于 TIC 来说，信噪比意义并不大，通常在处理 SIM 或 MRM 数据时才计算此值。

若输入多个噪音时间段，用逗号间隔。

The screenshot displays the Agilent MassHunter interface. The 'Method Editor: Calculate Signal-to-Noise' window is open, showing the following settings:

- Signal measurement: Height
- Noise measurement: Peak-to-Peak
- Noise regions: 9.7-9.9 min

The chromatogram shows a peak at 9.427 min with a signal-to-noise ratio (SNR) of 739.1. A table of peaks is shown on the right:

Retention Time (min)	Type	Width	SNR
239		0.06	18.9
205.1		0.12	325.1
239.1		0.099	343.2
256.1		0.15	739.1
271.1		0.083	108.6
283.2	M	0.075	457.7
269.1		0.098	11.6
207.1		0.12	87.2
280.1		0.098	3.5
280.1		0.173	108.4
280.1		0.083	116.8
279.1		0.165	219.6

Red callouts provide instructions: '计算信噪比后，在谱图的题头显示这张谱图最强峰的信噪比。' (After calculating SNR, the SNR of the strongest peak in the spectrum is displayed in the header.) and '在积分列表中 (view peak list) 可看到多个色谱峰的信噪比。' (In the integration list (view peak list), you can see the SNR of multiple chromatographic peaks.)

Another callout points to the 'Noise regions' field: '设置噪音范围 Noise regions (多段噪音, 用逗号间隔)' (Set noise range Noise regions (multiple noise segments, use commas for intervals)).

1.2.4 查找和识别化合物

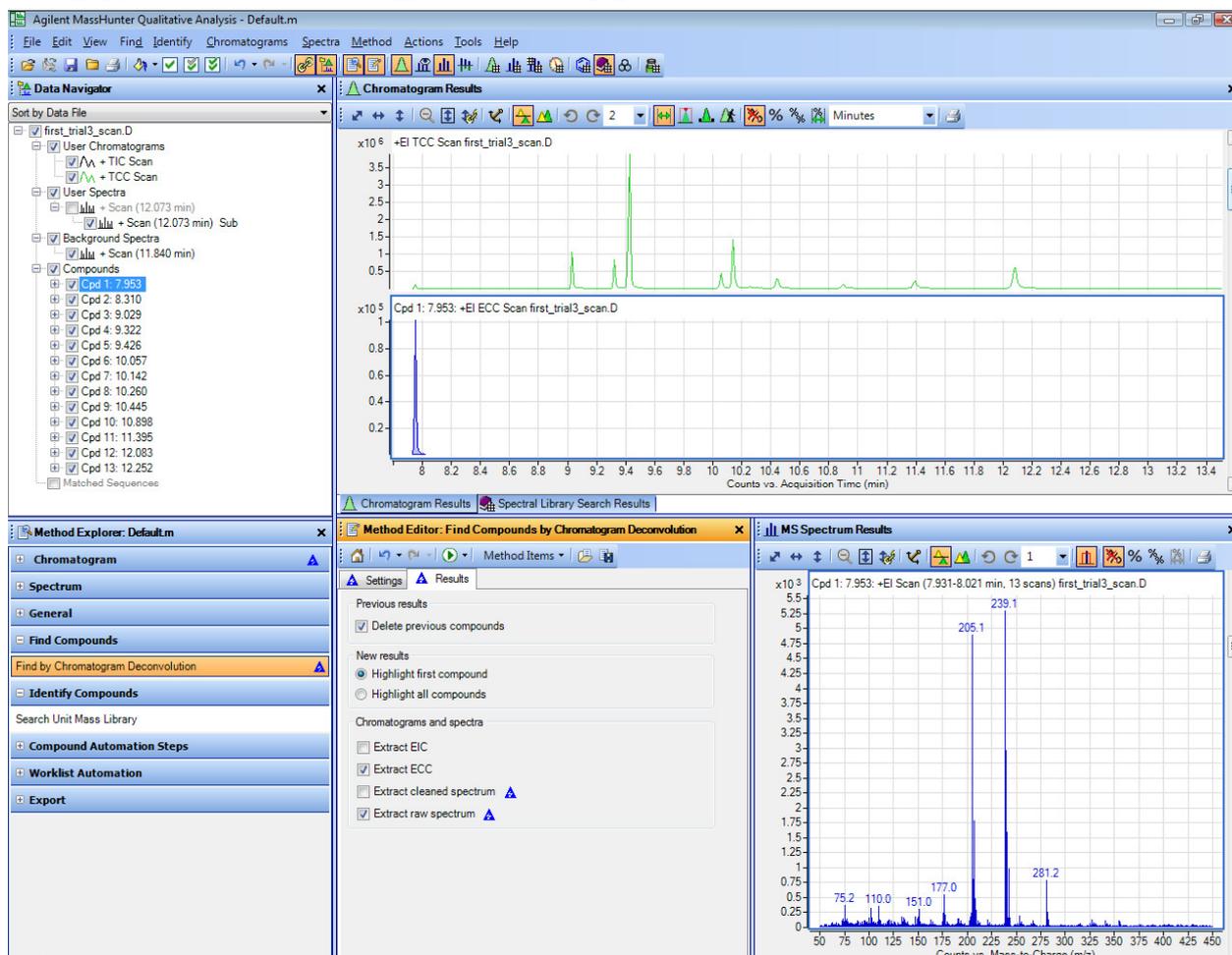
MS 数据可以通过解卷积的方式自动查找结果色谱图中可能存在的化合物，在 Exclude m/z 窗口中填入排除的质量数，例如 28 (氮气)，149 (增塑剂)，207 (硅氧烷柱流失) 等，修改 threshold 值得到的检索结果中化合物个数会有所不同。(设置参数时如果对某参数不了解，可以按 F1 得到帮助)，在 SNR threshold 窗口中输入您期待检出化合物的最小信噪比。为了下一步能够做化合物的谱库检索，请在 result 选项中，选中 Extract raw spectrum 而不是 Extract cleaned spectrum. 否则得到的结果可能与真实情况大相径庭。

The screenshot shows the 'Method Editor: Find Compounds by Chromatogram Deconvolution' window. The 'Settings' tab is active, showing the following parameters:

- Resolution: RT window size factor: 100.00
- Peak filter: Excluded m/z: 28, 149, 207 (example: 46, 48)
- Spectrum peak threshold: 5.00 %
- SNR threshold: 20
- Extraction window: Left m/z delta: 0.3, Right m/z delta: 0.7, m/z delta units: AMU

The 'Results' tab is also visible, showing options for 'Previous results' (Delete previous compounds) and 'New results' (Highlight first compound, Highlight all compounds). Under 'Chromatograms and spectra', the 'Extract raw spectrum' option is checked.

如下图，共找到附和检索条件的化合物 13 个，并分别显示出了这 13 种化合物的提取色谱图及质谱图。经过查看质谱图，第 13 峰明显为柱流失，可通过点击右键手动删除。



1.2.5 谱库检索

上一步我们通过解卷积得到了 13 个未知化合物，如果想要对这些化合物通过谱库检索来定性，你可以按照以下步骤进行：

- 方法浏览栏选择 Identify Compounds 下 Search Unit Mass Library；
- 选好要使用的谱库 NIST08.L；
- 选定要检索的化合物；
- 按一下  开始检索。

软件会自动将匹配度最高的化合物名称填写到数据栏，因为我们使用的是没有扣过背景的质谱图作的自动检索，所以匹配度没有手动检索的高，在不确定时可以按 1.1.3 和 1.1.4 所描述的方法先得到一张扣过背景的质谱图，然后在生成的质谱图上单击右键选择 Search Library for Spectra 得到该化合物的谱库检索结果。如果匹配有误，可手动选择正确的化合物名称。

Best	Name	Formula	CAS	Match Score	Mass (Library)	RT (Library)
<input checked="" type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c...	C14H9CIN2	4015-28-5	87.5	240	0
<input type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c...	C14H9CIN2	4015-28-5	80.7	240	0
<input type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c...	C14H9CIN2	4015-28-5	80.2	240	0
<input type="checkbox"/>	Benzonitrile, 4-(...	C14H9CIN2	303214-71-3	57.8	240	0
<input type="checkbox"/>	(4,6-Dichloro[1,3...	C9H6Cl2N4	2272-40-4	56.4	240	0
<input type="checkbox"/>	Oxazepam	C15H11CIN2O2	604-75-1	56.2	286.1	0
<input type="checkbox"/>	Oxazepam	C15H11CIN2O2	604-75-1	54.6	286.1	0
<input type="checkbox"/>	(4,6-Dichloro[1,3...	C9H6Cl2N4	2272-40-4	54.5	240	0
<input type="checkbox"/>	Oxazepam	C15H11CIN2O2	604-75-1	53.9	286.1	0
<input type="checkbox"/>	5,6-Dimethyl-4-p...	C14H12N2S	94639-18-6	53.4	240.1	0

*上图中显示的化合物 1 扣除背景后的检索结果与未扣除背景的一致，但具体参看匹配度会发现不同。

The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis software interface. The main window is titled "Spectral Library Search Results: Cpd 1: Quinazoline-6-chloro-4-phenyl".

Best	Name	Formula	CAS	Match Score	Mass (Library)	RT (Library)
<input checked="" type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c.	C14H9ClN2	4015-28-5	79.3	240	0
<input type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c.	C14H9ClN2	4015-28-5	76.6	240	0
<input type="checkbox"/>	Quinazoline-6-c.	C14H9ClN2	4015-28-5	74.1	240	0
<input type="checkbox"/>	5,6-Dimethyl-4-p.	C14H12N2S	94639-18-6	59.8	240.1	0
<input type="checkbox"/>	(4,6-Dichloro)1,3.	C9H6Cl2N4	2272-40-4	58.8	240	0
<input type="checkbox"/>	(4,6-Dichloro)1,3.	C9H6Cl2N4	2272-40-4	57.4	240	0
<input type="checkbox"/>	Benzonitrile, 4-(C14H9ClN2	303214-71-3	55	240	0
<input type="checkbox"/>	9H-Cyclopenta[fa]	C19H12	50861-05-7	54.2	240.1	0
<input type="checkbox"/>	Pyrrrol[2,3-f]qui.	C15H16N2O	199919-66-9	54	240.1	0
<input type="checkbox"/>	Oxazepam	C15H11ClN2O2	604-75-1	50.9	286.1	0

The Structure Viewer on the right shows the chemical structure of Quinazoline-6-chloro-4-phenyl. The MS Spectrum Results plot shows the mass spectrum of the compound, with major peaks at m/z 177.1, 205.1, and 239.1.

检索得到的结构式会自动附在谱图上，如果想单独显示可以按下 ，结果如上图。

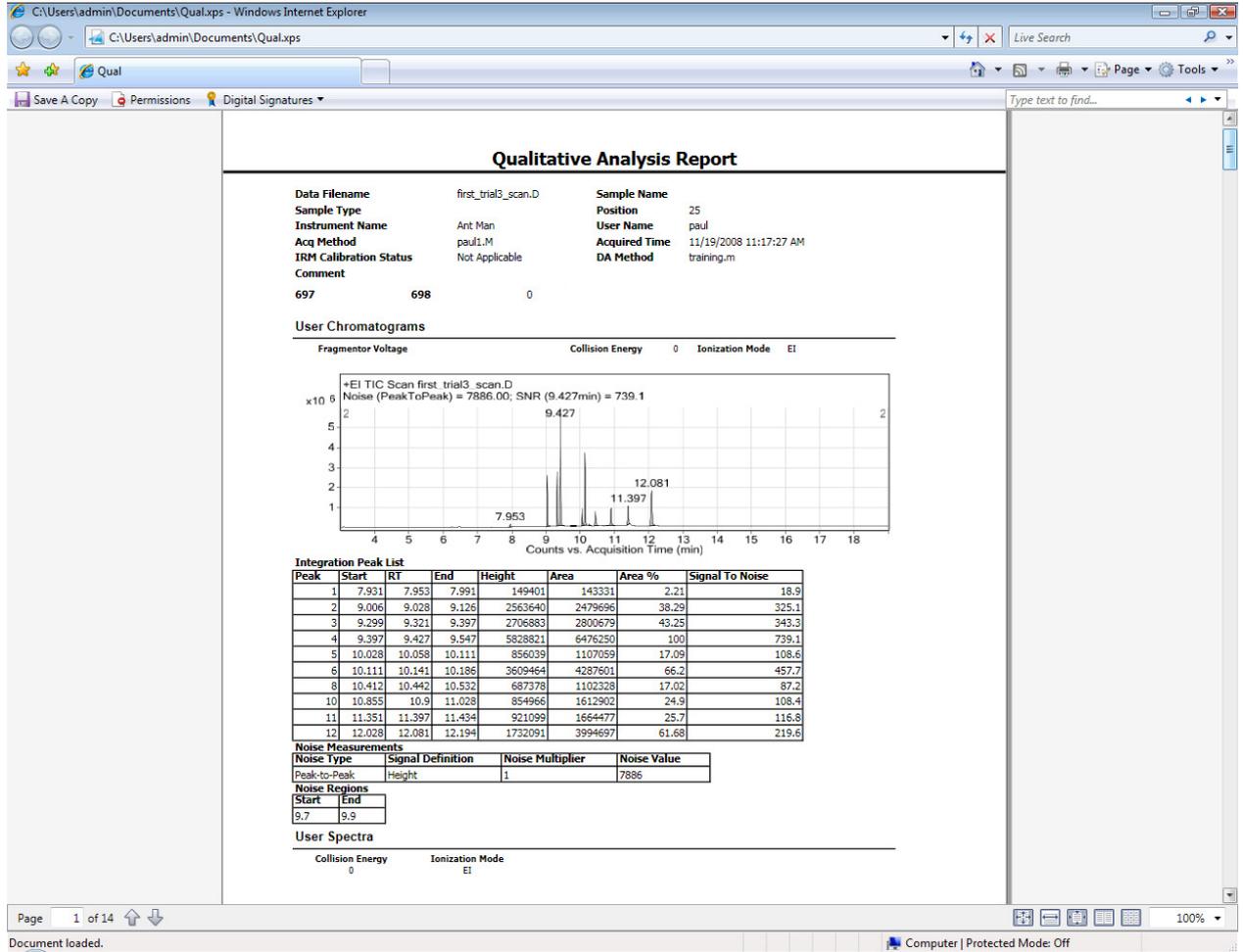
1.2.6 输出报告

选择 General 下面的 Analysis Report，选择报告要包含的选项，然后点击绿箭头，在弹出的窗口中选择要出报告的数据，指定打印机等选项，点击 OK 得到报告。

The screenshot shows the "Method Editor: Analysis Report" dialog box. The "Analysis Report" section is selected in the left-hand menu. The right-hand pane contains the following options:

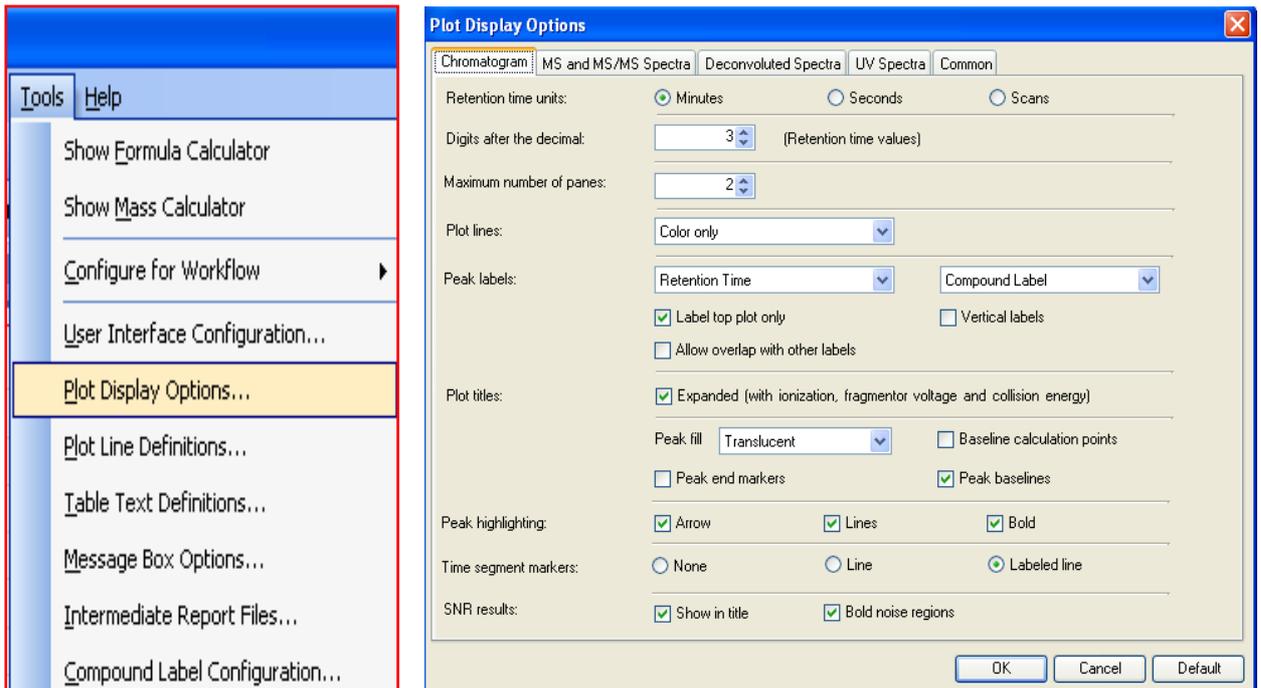
- User chromatograms**
 - Show user chromatograms
 - With peak tables
 - With signal to noise results
- User spectra**
 - Show user spectra
 - With peak tables
 - With library spectrum
 - With difference spectrum
- Compounds**
 - Show compound chromatograms
 - With peak tables
 - Show compound spectra
 - With peak tables

得到的报告显示于下：报告共 14 页，包含了方法编辑界面中定义的所有内容。



1.2.7 谱图显示选项

在谱图显示选项中，可以更改色谱图和质谱图的显示。比如修改质荷比的小数点后的位数。根据四极杆类质谱的分辨率，一般小数点后保留一位比较合适。



第二篇 定量分析

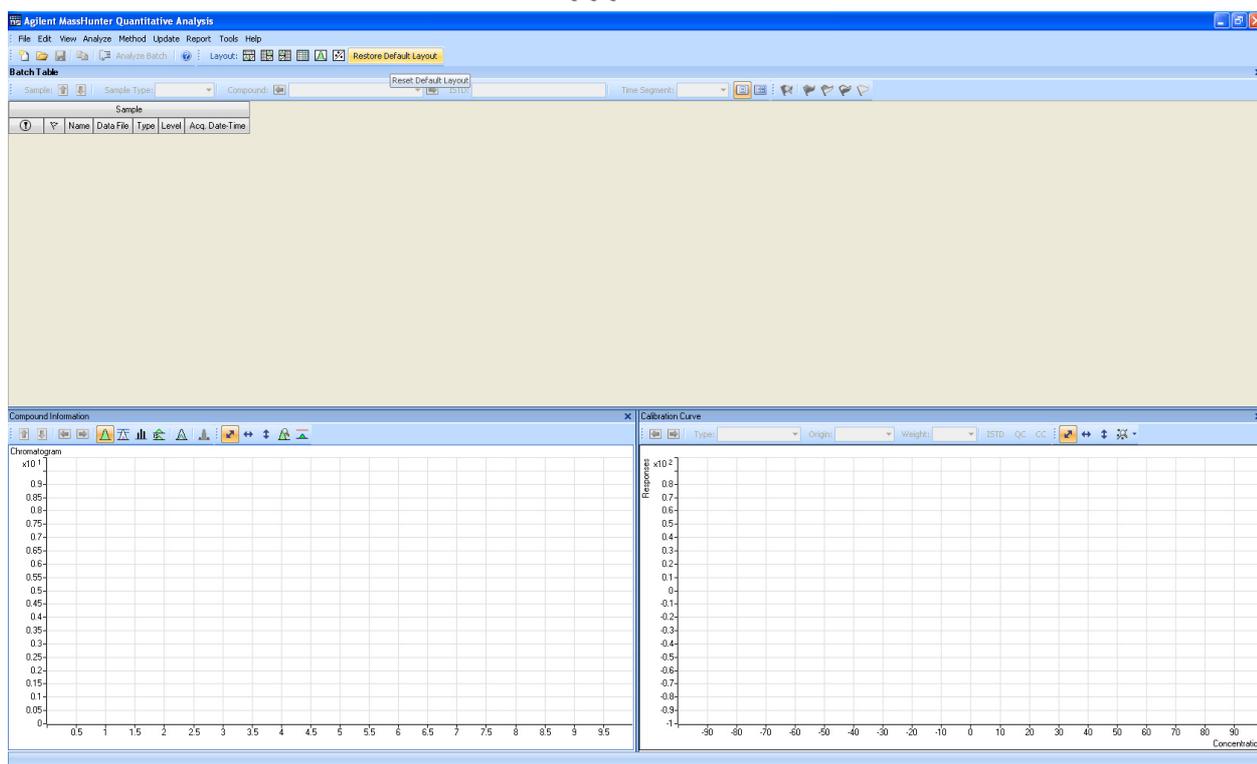
培训目的

熟悉安捷伦 MassHunter 工作站，了解其主要界面及相关功能；
能够正确使用该软件完成一次典型的定量分析并打出定量报告。

2.1 创建定量的批处理和定量方法



通过程序组、桌面快捷方式  均可以打开 QQQ 定量分析软件。默认窗口如下：



单击工具栏恢复为缺省布局 按钮“Restore Default Layout” 确认主画面使用缺省布局：

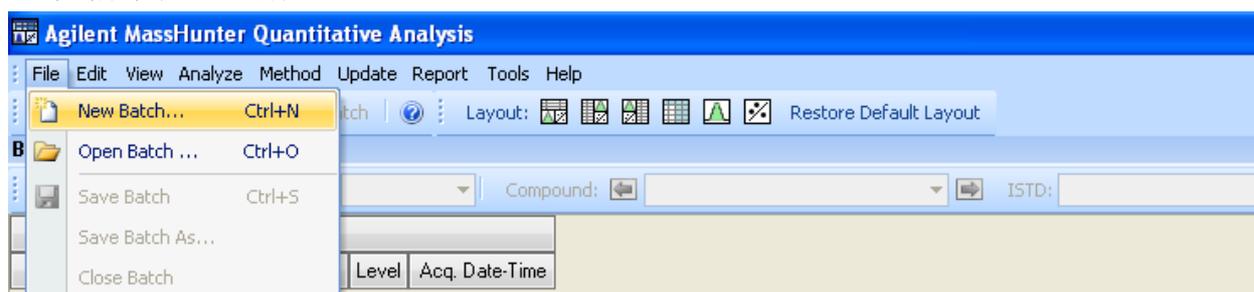
练习前将数据采集软件光盘\Supplemental\QQQ Method Optimization Assistant\Product Ion Scan 目录下的 PEST 文件夹拷贝到 D: \MassHunter\Data\目录下。此文件夹将包含我们练习所要使用的所有数据。
本部分基于已经采集到的 MRM 数据来创建批处理和方法，参见下面步骤进行练习：

定量流程

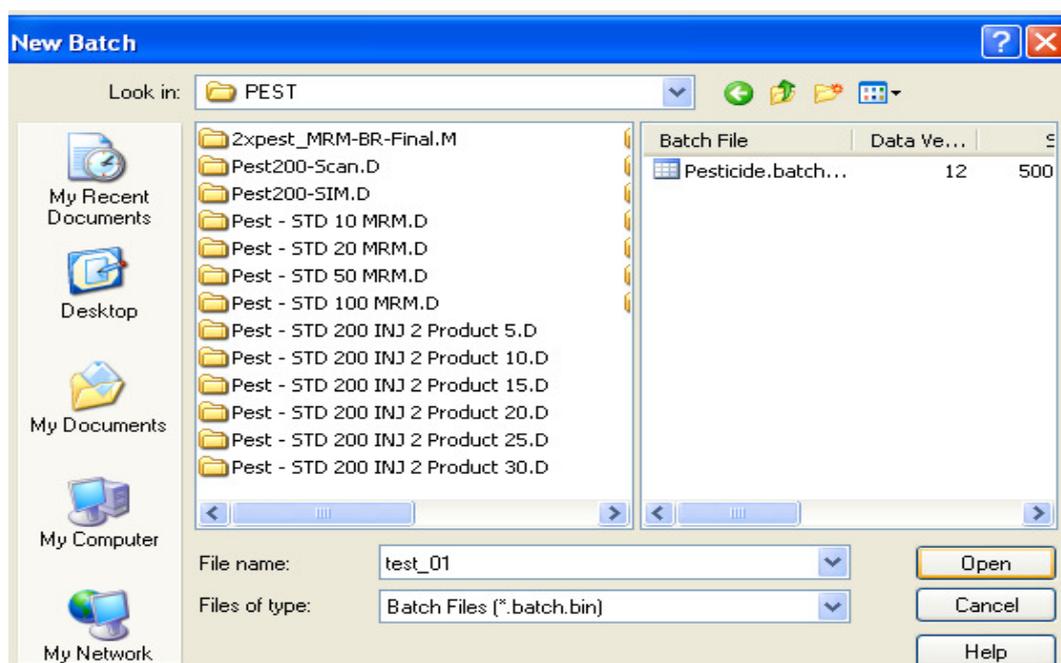
- **第一步 新建 Batch**
- **第二步 向 Batch 中引入数据文件**
- **第三步 检查/补充定量数据的信息**
- **第四步 新建定量方法**
 - 1 MRM Compound Setup
 - 2 Retention Time Setup
 - 3 ISTD Setup (内标法)
 - 4 Concentration Setup
 - 5 Qualifier Setup (多个 transitions 时)
 - 6 Calibration Curve Setup
 - 7 Validate method
 - 8 退出并保存定量方法
- **第五步 检查定量结果**
 - 修改定量选项 保存定量 batch batch 输出

2.1.1 新建 batch

单击菜单项 File 选择 New Batch

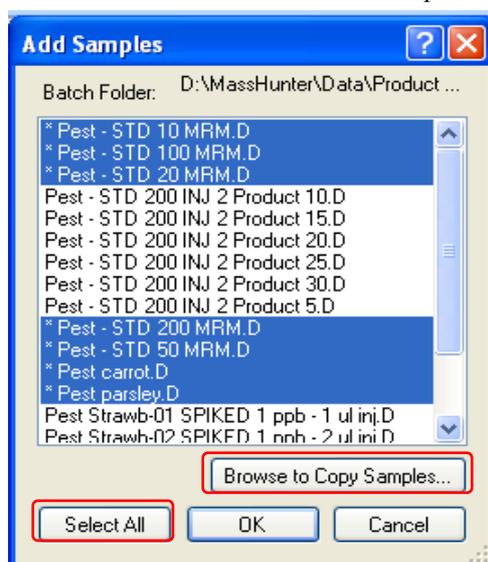


在新的批处理对话框，找到文件夹“D:\MassHunter\Data\Product Ion Scan\PEST”，输入批处理文件名“Test_01”并单击 Open 按钮创建一个新的批处理文件：



2.1.2 向 Batch 中引入数据文件

单击菜单项 File 选择 Add Samples:



- 选择定量数据。
- 适当时候选择 Select All。
- Browse to Copy Samples 可从其它路径下的数据复制过来一起参与定量。

本练习选用 Pest - STD 10 MRM.D、Pest - STD 20 MRM.D、Pest - STD 50 MRM.D、Pest - STD 100 MRM.D、Pest - STD 200 MRM.D、Pest carrot.D 以及 Pest parsley.D 来作为练习数据。

2.1.3 检查/补充定量数据的信息

确认数据类型(Type)和标样的浓度级别(Level)。

注意样品类型 (Type) 的选择:

Sample 未知待测样品

Blank 空白样品

Cal 标准样品 (用于形成工作曲线)

QC (quality control) 质控样品

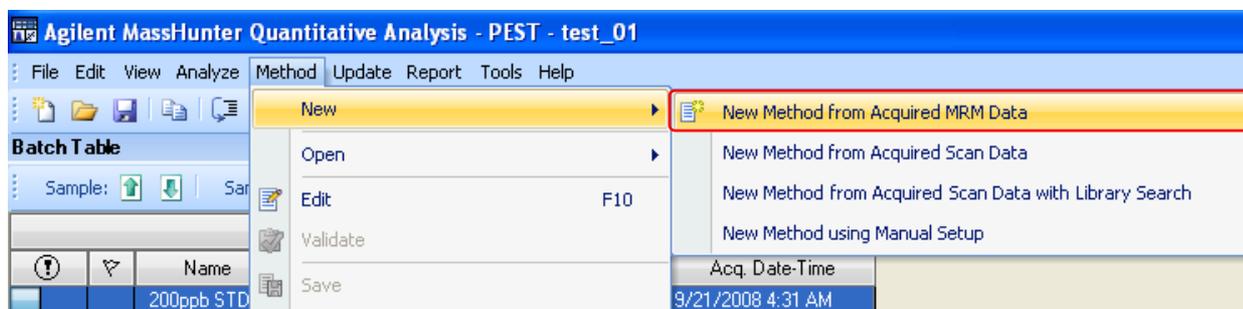
添加数据后将标样数据的 Type 修改为 Cal, 在 Level 栏按浓度从小到大顺序分别修改为 L1~L5。本例中未添加 QC 及 Blank 类型的数据, 实际实验中根据需要添加。

Sample						
?	▼	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time
		200ppb STD	Pest - STD 200 MRM.D	Cal	L5	9/21/2008 4:31 AM
		100ppb STD	Pest - STD 100 MRM.D	Cal	L4	9/21/2008 4:54 AM
		50ppb STD	Pest - STD 50 MRM.D	Cal	L3	9/21/2008 5:18 AM
		20ppb STD	Pest - STD 20 MRM.D	Cal	L2	9/21/2008 5:45 AM
		10 ppb STD	Pest - STD 10 MRM.D	Cal	L1	9/21/2008 6:10 AM
		Sample 1 Parsl	Pest carrot.D	Sample		9/21/2008 7:00 AM
▶		Sample 3 Carrot	Pest parsley.D	Sample		9/21/2008 7:24 AM

2.2 新建定量方法

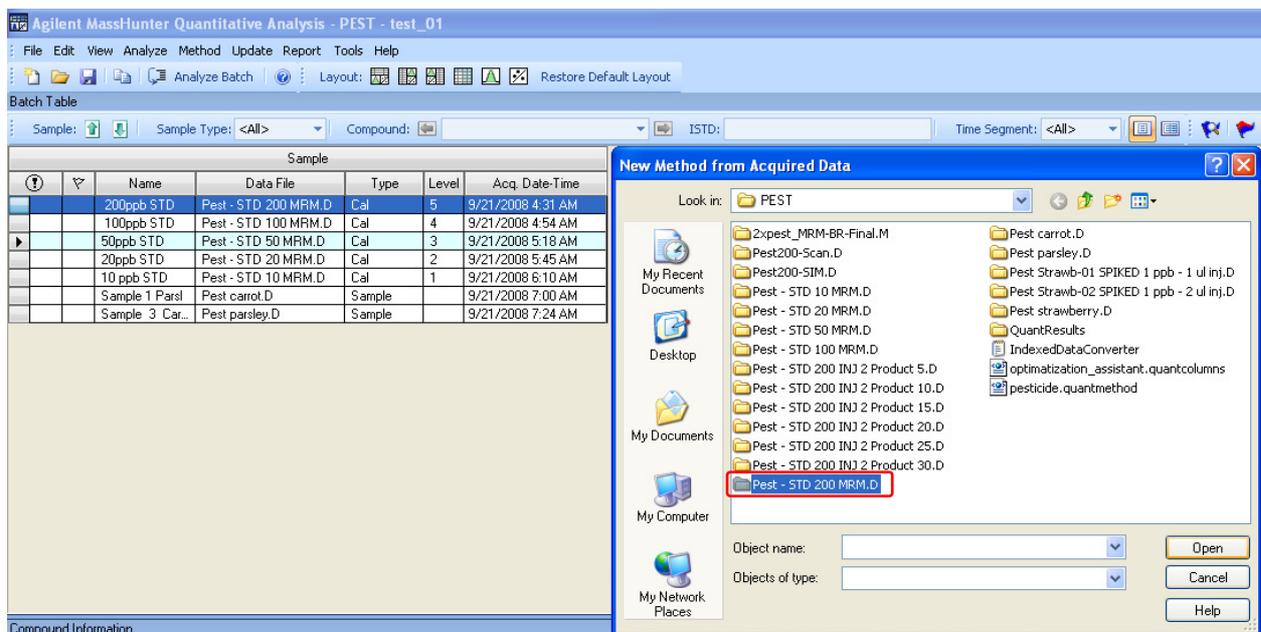
新建定量方法时两个选项: “New Method from Acquired MRM Data” 在数据基础上建立方法, 推荐使用; “New Method using Manual Setup” 手动建立方法。

如果已有定量方法, 可以选择 method---open---open method from existing batch (使用已有的 batch 中的定量方法) 或者选择 open method from existing file (使用存好的定量方法文件)。

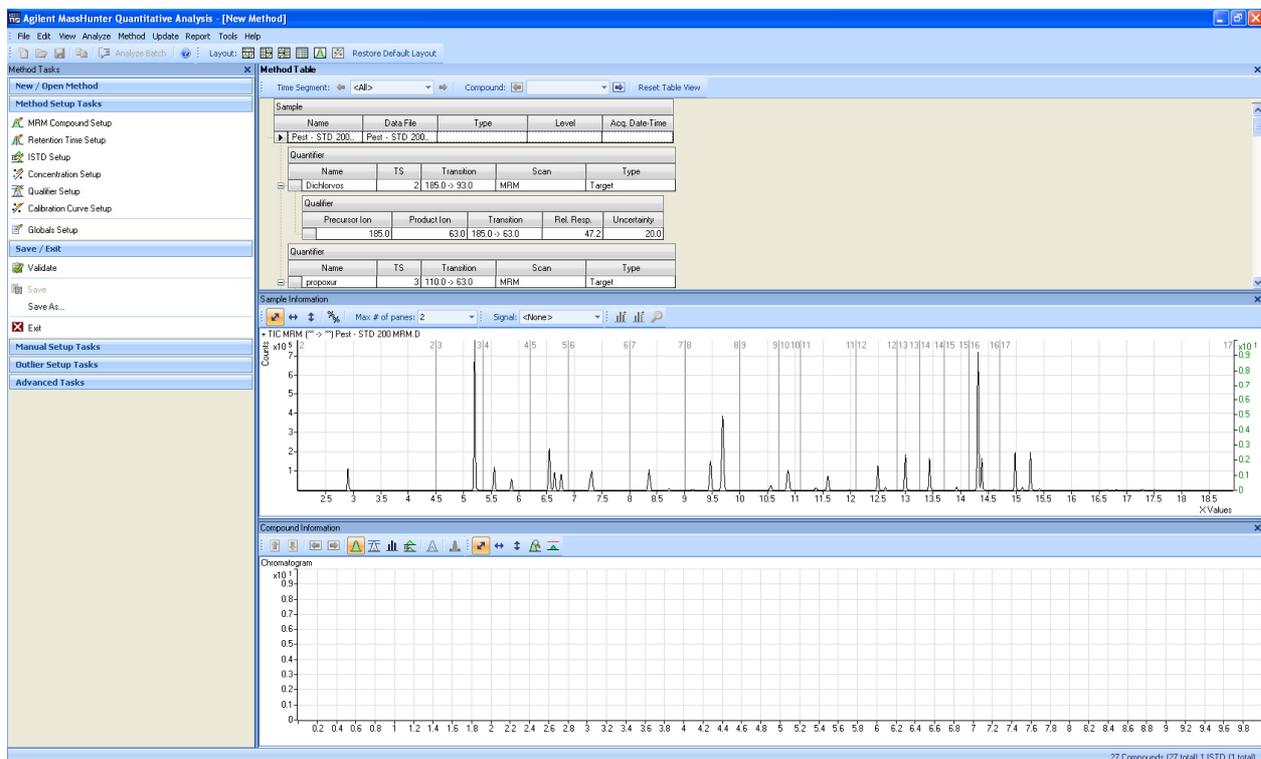


选择浓度最高的标样数据 Pest - STD 200 MRM.D 点击 “open” 打开。

Tips: 建议在切换软件到方法编辑模式前先选择信号最好的数据。这样, 最有代表性的色谱图和质谱图可以很容易的在方法编辑模式下看到。保留时间和限定离子比例可以使用最有代表性的样品谱图 (较高浓度) 在方法编辑模式下可以直接更新。



打开后显示界面如下：



2.2.1 MRM Compound setup

单击左侧 MRM 化合物设置“MRM Compound setup”检查导入的用于 MRM 化合物设置的采集参数：化合物类型，要定量的目标化合物选为 Target，内标化合物选为 ISTD。如果为外标法定量则不用指认内标化合物。

MRM 数据的 transition, precursor ion 和 product ion 等信息自动传到当前定量方法中。

本例中实际标准品不含化合物 Isufenphos-Methyl 和 Mecarbam, 所以显示未找到该化合物（选中该化合物时，无谱图显示，保留时间为 0.00），左键点击化合物左边方框选中这两个化合物，点击右键将其删除。

Name	TS	Transition	Scan	Type	Precursor Ion	Product Ion	RT
BHC gama delta	6	219.0 -> 183.0	MRM	Target	219.0	183.0	7.322
diazinon	6	304.0 -> 179.0	MRM	Target	304.0	179.0	7.287
chlorpyrifos m...	7	286.0 -> 93.0	MRM	Target	286.0	93.0	8.349
malaoxon	7	268.0 -> 222.0	MRM	Target	268.0	222.0	8.453
vinclozolin	7	212.0 -> 172.0	MRM	Target	212.0	172.0	8.368
teproimorph	8	128.0 -> 70.0	MRM	Target	128.0	70.0	9.693
malathion	8	173.0 -> 99.0	MRM	Target	173.0	99.0	9.467
pendimethalin	9	252.0 -> 161.0	MRM	Target	252.0	161.0	10.561
isofenphos-meth...	10	255.0 -> 213.0	MRM	Target	255.0	213.0	0.000
		272.0	MRM	Target	329.0	272.0	0.000
		206.0	MRM	Target	241.0	206.0	11.374
		220.0	MRM	Target	222.0	220.0	11.594
		206.0	MRM	Target	241.0	206.0	12.628
		131.0	MRM	Target	206.0	131.0	12.503
		132.0	MRM	Target	163.0	132.0	12.995
		253.0	MRM	Target	387.0	253.0	13.433
		272.0	MRM	Target	307.0	272.0	13.435
		169.0	MRM	ISTD	326.0	169.0	13.919
		183.0	MRM	Target	341.0	183.0	14.375
		77.0	MRM	Target	160.0	77.0	14.308
		141.0	MRM	Target	197.0	141.0	15.260
		237.0	MRM	Target	272.0	237.0	14.979

2.2.2 Retention Time Setup

单击保留时间设置“Retention Time Setup”检查确认导入的参数（建议在样品分析时尽量按保留时间分组，以免干扰）：

检查保留时间是否对应 Left RT Delta 和 Right RT Delta 可以设置保留时间范围，当保留时间漂移比较多时，也可以适当放宽范围以确保找到目标峰，本例中均设置为0.2min。也可设为偏移单位为百分数，按实际需要选择。

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Dichlorvos	2	185.0 -> 93.0	MRM	Target	2.903	0.200	0.200	Minutes
propoxur	3	110.0 -> 63.0	MRM	Target	5.199	0.200	0.200	Minutes
chlorpropham	4	213.0 -> 171.0	MRM	Target	5.559	0.200	0.200	Minutes
trifluralin	4	306.0 -> 264.0	MRM	Target	5.862	0.200	0.200	Minutes
BHC Beta	5	219.0 -> 183.0	MRM	Target	6.644	0.200	0.200	Minutes
Carbaryl	5	164.0 -> 149.0	MRM	Target	6.653	0.200	0.200	Minutes
BHC gama delta	6	219.0 -> 183.0	MRM	Target	7.322	0.200	0.200	Minutes
diazinon	6	304.0 -> 179.0	MRM	Target	7.287	0.200	0.200	Minutes
chlorpyrifos m...	7	286.0 -> 93.0	MRM	Target	8.349	0.200	0.200	Minutes
malaoxon	7	268.0 -> 222.0	MRM	Target	8.453	0.200	0.200	Minutes
vinclozolin	7	212.0 -> 172.0	MRM	Target	8.368	0.200	0.200	Minutes
teproimorph	8	128.0 -> 70.0	MRM	Target	9.693	0.200	0.200	Minutes
malathion	8	173.0 -> 99.0	MRM	Target	9.467	0.200	0.200	Minutes

2.2.3 ISTD Setup

点击内标物设定“ISTD Setup”，然后从下拉菜单“ISTD Compound Name”为每个目标化合物指定内标化合物（ISTD），并在ISTD Conc 列输入相应内标物浓度。

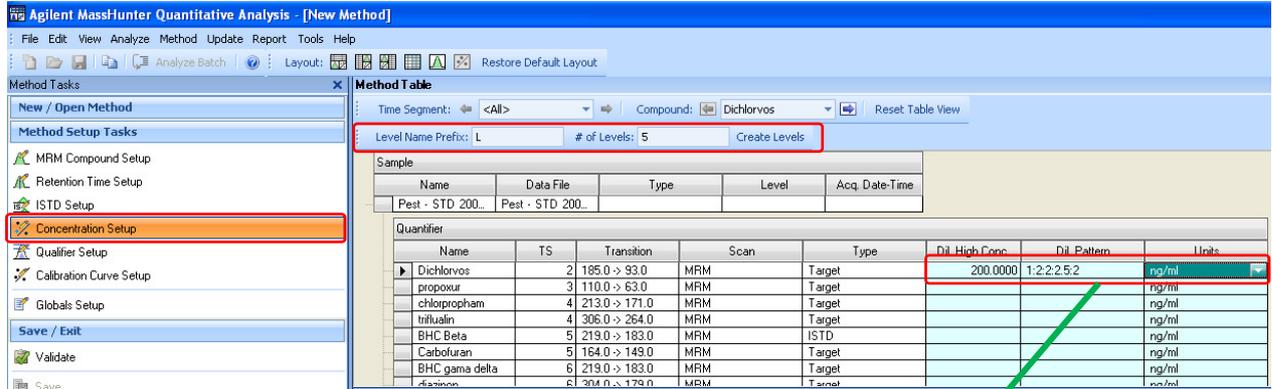
如果用外标法进行定量，则忽略这一步。

不同目标化合物可以匹配不同内标来定量，未选择内标物的化合物自动按外标法处理。

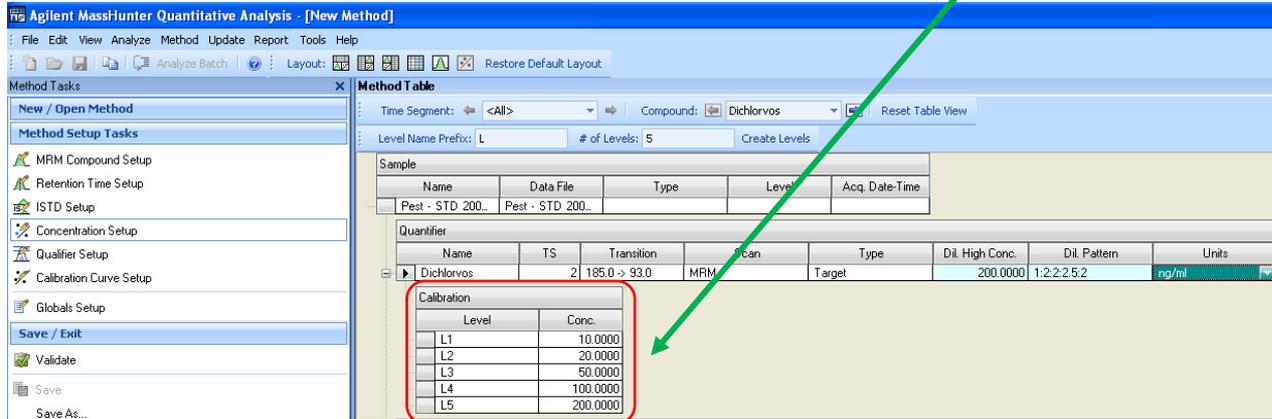
Name	TS	Transition	Scan	Type	ISTD Compound Name	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
malaoxon	7	268.0 -> 222.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
vinclozolin	7	212.0 -> 172.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
teproimorph	8	128.0 -> 70.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
malathion	8	173.0 -> 99.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
pendimethalin	9	252.0 -> 161.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
endosulfan alfa	11	241.0 -> 206.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
mepanipyrim	11	222.0 -> 220.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Endosulfan beta	12	241.0 -> 206.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
kresoxim methyl	12	206.0 -> 131.0	MRM	Target	<None>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
oxadiazol	13	163.0 -> 132.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
endosulfan sulfa...	14	387.0 -> 253.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
quinoxifen	14	307.0 -> 272.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
triphenyl phosph...	15	326.0 -> 169.0	MRM	ISTD	<None>	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Bromopropylate	16	341.0 -> 183.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
phosmet	16	160.0 -> 77.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
cyhalothrin	17	197.0 -> 141.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>
Mirex	17	272.0 -> 237.0	MRM	Target	triphenyl phosphate	<input type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>

2.2.4 Concentration Setup

点击浓度设定“**Concentration Setup**”，输入200到稀释的最高浓度（*Dil. High Conc*）；1:2:2:2.5:2 到稀释模式（*Dil. Pattern*）。确认浓度级别名称（*Level Name Prefix*）为 L 且 *# of Levels* 为 5（实际样品分析时可以不输入L），然后选择创建级别（*Create Levels*）：



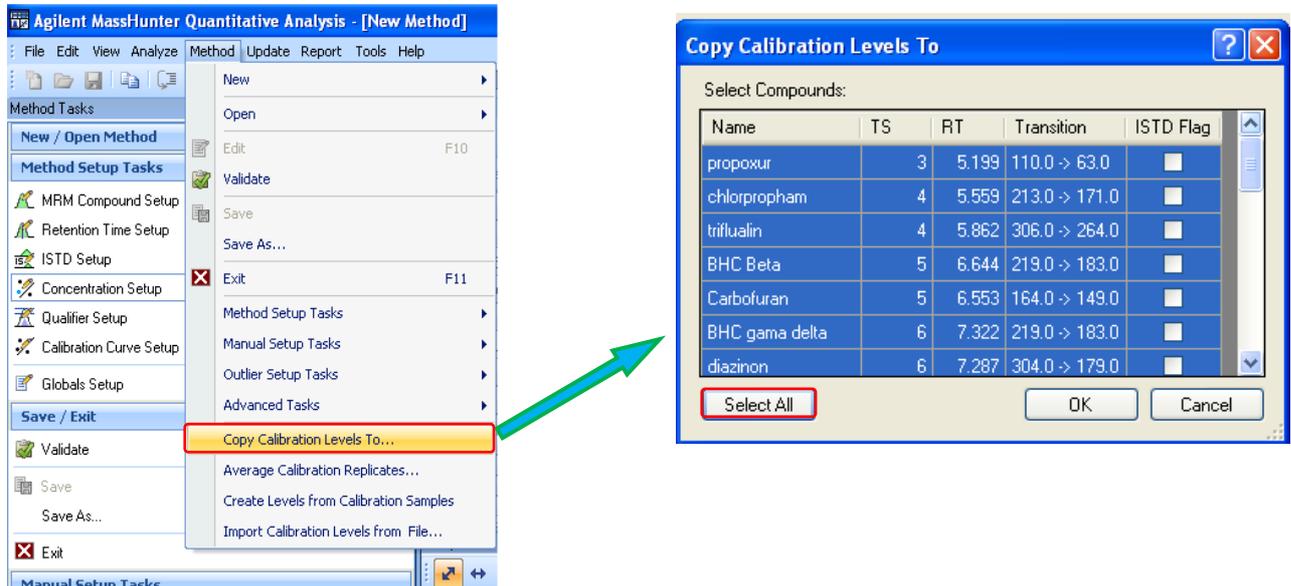
产生以下浓度梯度表：



生成的浓度级别，也可以再修改浓度。如果要添加浓度级别，点击右键选择“new calibration level”。用稀释比例来计算不同级别的浓度，更符合配制系列标样溶液的逻辑过程。

Copy calibration levels to 功能可方便的将某一化合物的浓度梯度应用到其他有相同浓度梯度的目标化合物上（根据标样的实际配制情况，选择是否应用此功能），而不用重复操作。在这个例子中所有目标化合物的浓度梯度一样，即将化合物“Dichlovos”的5级 level 应用到了其他目标化合物上。

在复制校正级别对话框，单击选择所有（**Select All**）对话框，然后单击**OK** 按钮：

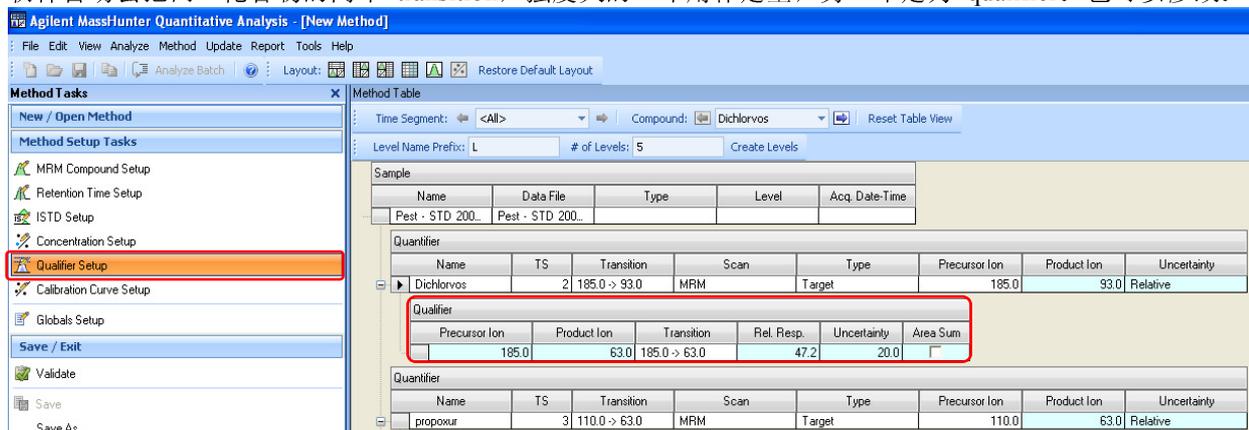


2.2.5 Qualifier Setup

点击辅助定性设定“Concentration Setup”进行辅助定性粒子的设定

Qualifier 为辅助定性离子。它的响应不参与定量。如果采集时各化合物离子只设置了一个transition, 则 qualifier 相关的各项设置可以忽略。

软件自动会把同一化合物的两个 transition, 强度大的一个用作定量, 另一个定为 qualifier。也可以修改。



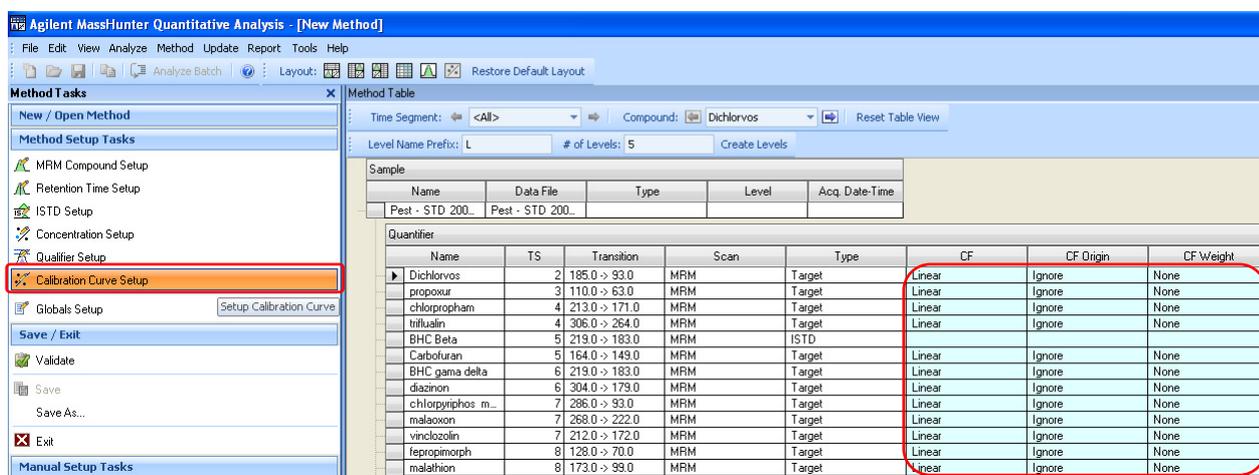
2.2.6 Calibration Curve Setup

点击校正曲线设置“Calibration Curve Setup”可对校正曲线类型(CF), 原点态度(CF Origin) 和是否加权计算(CF Weight)等参数进行设定。

一般校正曲线类型(CF)选择线性回归 (linear) 或二次方曲线 (quadratic)

原点态度(CF Origin) : 忽略原点 (Ignore), 包括原点 (Include), 强制过原点 (Force)。如果是单点法定量的话, 则不能选择忽略原点, 应该选择包括原点或强制过原点。

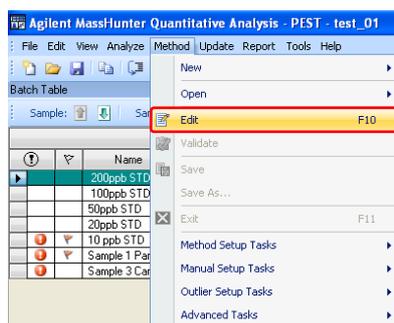
校正曲线的类型和对待原点的态度不同, 都会影响最后的定量结果。

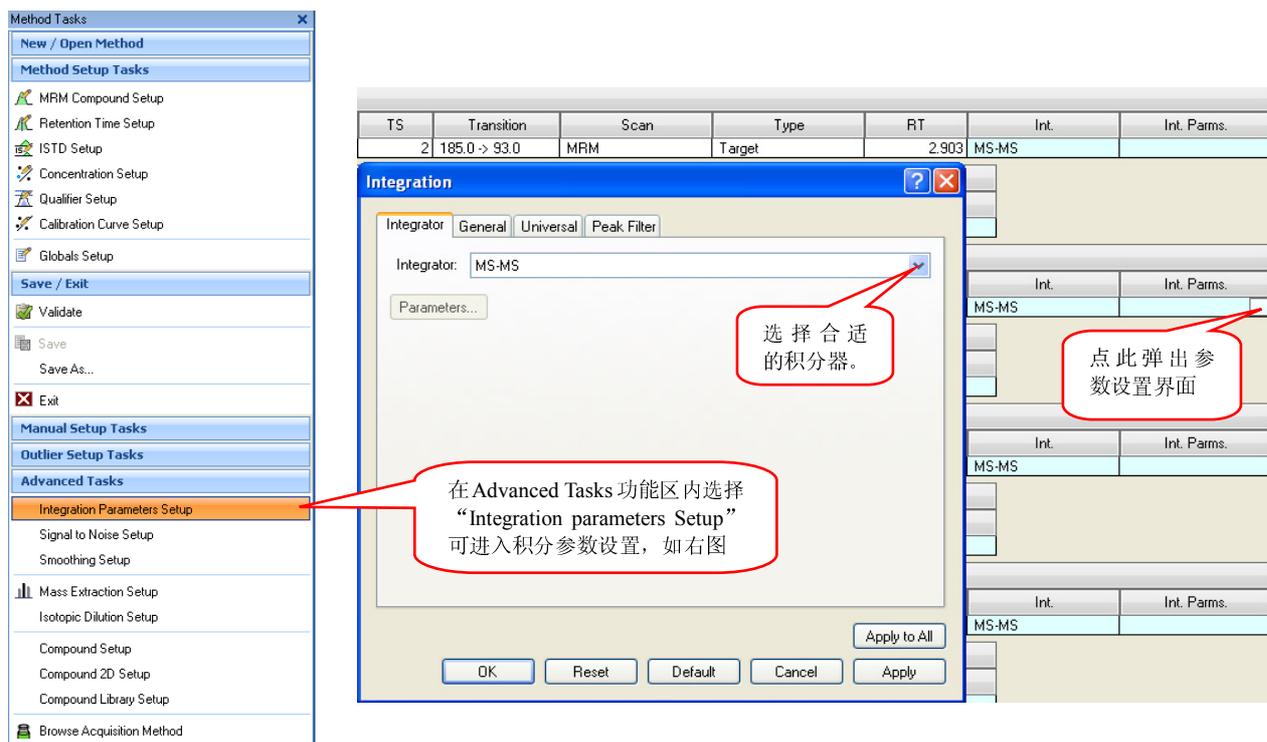


2.2.7 定量高级功能设定— 积分参数

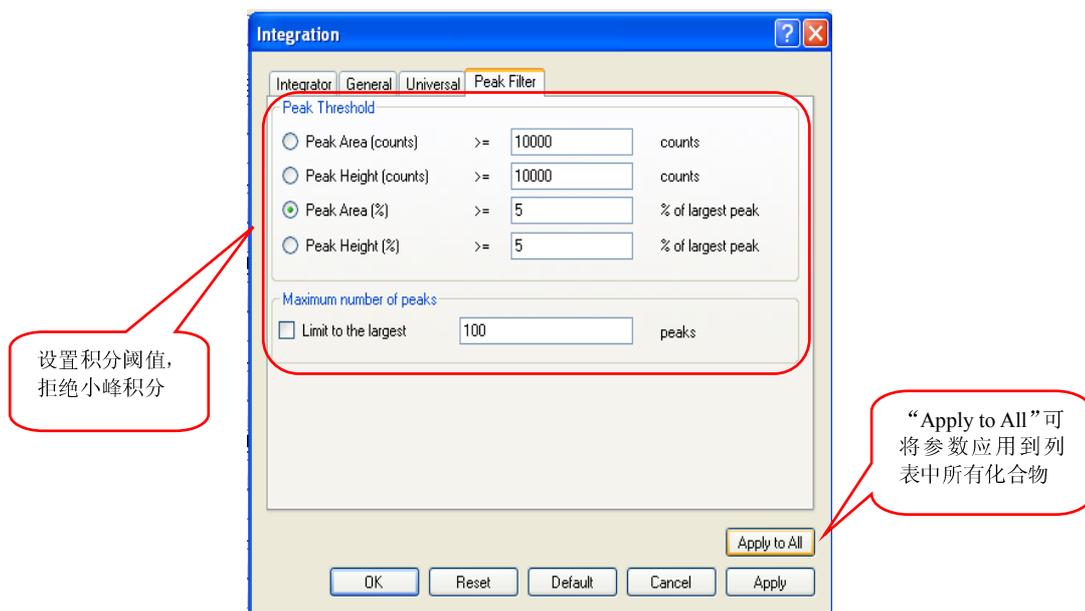
对于响应比较小的峰, 进行内标法计算的时候也有可能计算出比较大的定量结果。当然, 它的信噪比和限定离子比值不一定达标。为了避免误判, 可以设置积分阈值, 对小杂峰进行不积分处理。

点击菜单 Method 选择 Edit 再次进入方法编辑界面。





点击 Peak Filter 可对谱图中的小峰进行过滤。



设定完成后点击 OK 退出设置界面。

2.2.8 离群数据范围设置

利用离群数据的范围，可以快速有效帮助判断不合理数据。

常见的一般为保留时间，Qualifier 的比值和 Accuracy 容易出现离群现象。离群上下限可以在定量方法编辑中的 Outlier Setup Tasks 界面进行修改。

比如将保留时间的离群范围设置为 5%，如下图：

Quantifier	Name	TS	Transition	Scan	Type	Min. S/N	Custom Calc. Limit Low	Custom Calc. Limit High	RT Window	RT Units
	Dichlorvos	2	185.0 > 93.0	MRM	Target				5.000	Percent
	propranolol	3	110.0 > 63.0	MRM	Target				5.000	Percent
	chlorophenol	4	213.0 > 171.0	MRM	Target				5.000	Percent
	trifluolol	4	306.0 > 264.0	MRM	Target				5.000	Percent
	BHC Beta	5	219.0 > 183.0	MRM	Target				5.000	Percent
	Carboluran	5	164.0 > 149.0	MRM	Target				5.000	Percent
	BHC gamma delta	6	219.0 > 183.0	MRM	Target				5.000	Percent
	diazinon	6	304.0 > 179.0	MRM	Target				5.000	Percent
	chlorpyrifos m...	7	286.0 > 93.0	MRM	Target				5.000	Percent
	malaoxon	7	268.0 > 222.0	MRM	Target				5.000	Percent
	vinclozolin	7	212.0 > 172.0	MRM	Target				5.000	Percent
	teprophosph	8	128.0 > 70.0	MRM	Target				5.000	Percent
	malathion	8	173.0 > 99.0	MRM	Target				5.000	Percent
	pendimethalin	9	252.0 > 161.0	MRM	Target				5.000	Percent
	endosulfan alla	11	241.0 > 206.0	MRM	Target				5.000	Percent
	metoprolol	11	222.0 > 220.0	MRM	Target				5.000	Percent
	Endosulfan beta	12	241.0 > 206.0	MRM	Target				5.000	Percent
	kresoxim methyl	12	206.0 > 131.0	MRM	Target				5.000	Percent
	oxadiazol	13	163.0 > 132.0	MRM	Target				5.000	Percent
	endosulfan sulfa...	14	367.0 > 253.0	MRM	Target				5.000	Percent
	quinoxifen	14	307.0 > 272.0	MRM	Target				5.000	Percent
	triphenyl phosph...	15	326.0 > 169.0	MRM	ISTD				5.000	Percent
	Bromopropylate	16	341.0 > 183.0	MRM	Target				5.000	Percent
	phosmet	16	160.0 > 77.0	MRM	Target				5.000	Percent
	cyclohexim	17	197.0 > 141.0	MRM	Target				5.000	Percent
	Mirex	17	272.0 > 237.0	MRM	Target				5.000	Percent

2.2.9 Validate method

选择方法检查“**Validate method**”项可对方法中的设定进行一次评估。

如果定量方法中漏填了相关信息，或者方法设置中有矛盾的地方，进行validate，报错信息会在 **Method error list** 窗口中显示。

双击某一错误的行，则自动激活需要修改的项目，方便您检查。



Category	Message
Warning	ISTDFlag must be set for compounds of type ISTD
Warning	Curve fit is undefined
Warning	Curve fit origin is undefined
Warning	Curve fit weight is undefined
Warning	Relative retention time limits have no effect for ISTD compounds
Warning	ISTD concentration is undefined

修改完成后需再次检查，直到没有错误出现，方法检查完成。

2.2.10 退出并保存定量方法

点击“EXIT”退出定量方法编辑界面，选择“yes”将方法应用到当前的Patch。

也可以在退出定量方法编辑前，另存定量方法（后缀为`quantmethod.xml`）。这样将来进行同一项目其他数据的定量时，可以直接调用此定量方法进行定量（选择open method from existing file），而不用重新建立定量方法。

The screenshot shows the Agilent MassHunter Quantitative Analysis interface. The 'Method Table' is visible, listing various compounds and their parameters. A dialog box titled 'Agilent MassHunter Quantitative Analysis' is displayed, asking 'Would you like to apply this method to the batch?'. The 'Yes' button is highlighted with a red box. Below the dialog, a chromatogram shows a peak at 14.979 minutes. The 'Compound Information' section shows details for the selected peak.

Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time
	Pest - STD 200...	Pest - STD 200...			

Quantifier	Name	TS	Transition	Scan	Type	ISTD Compound Name	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
	Dichlorvos	2	185.0 > 93.0	MRM	Target	BHC Beta			
	propoxur	3	110.0 > 63.0	MRM	Target	BHC Beta			
	chlorpropham	4	213.0 > 171.0	MRM	Target	BHC Beta			
	thiufen	4	326.0 > 264.0	MRM	Target	BHC Beta			
	BHC Beta	5	219.0 > 183.0	MRM	ISTD	<None>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	
	Carbolfuran	5	164.0 > 149.0	MRM	Target	BHC Beta			
	BHC gama delta	6	219.0 > 183.0	MRM	Target	BHC Beta			
	flutolanil	6	304.0 > 339.0	MRM	Target	BHC Beta			

2.3 数据分析

2.3.1 Analyze Batch

退出定量方法编辑界面后，点击 **Analyze Batch**，即用当前方法进行定量计算。

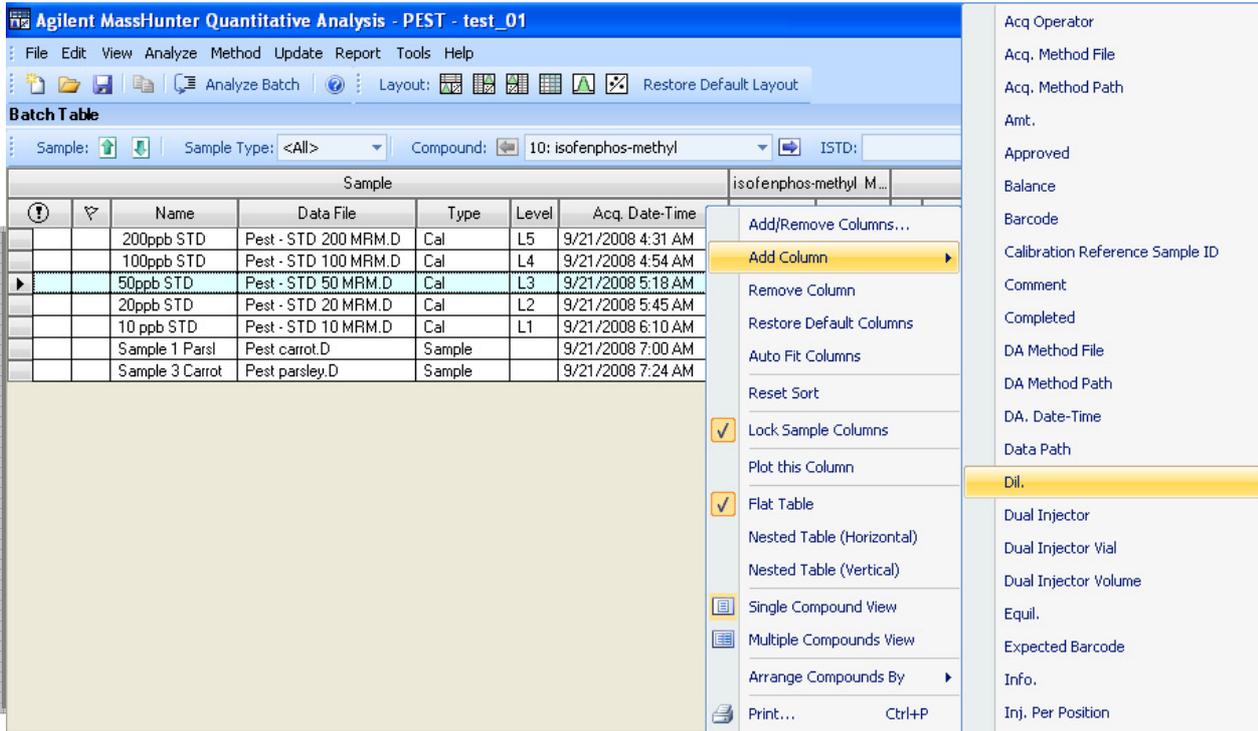
如果在 **Analyze Batch** 过程中出现类似以下的错误，请按照错误信息修改相应参数，在编辑数据采集方法时如果输入的参数都正确，则可避免此类错误发生：

The screenshot shows the Agilent MassHunter Quantitative Analysis interface during a batch analysis. The 'Batch Table' is visible, listing various samples and their parameters. An error dialog box titled 'Agilent MassHunter Quantitative Analysis' is displayed, indicating 'Batch analysis failed' and 'Sample not validated: Invalid dilution factor: must be positive.' The 'OK' button is highlighted with a red box.

Sample						isofenphos-methyl M...		isofenphos-methyl Results				
Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	Multiplier	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy
200ppb STD	Pest - STD 200 MRM.D	Cal	L5	9/21/2008 4:31 AM	200.0000	0.0						
100ppb STD	Pest - STD 100 MRM.D	Cal	L4	9/21/2008 4:54 AM	0.0							
50ppb STD	Pest - STD 50 MRM.D	Cal	L3	9/21/2008 5:18 AM	0.0							
20ppb STD	Pest - STD 20 MRM.D	Cal	L2	9/21/2008 5:45 AM	0.0							
10 ppb STD	Pest - STD 10 MRM.D	Cal	L1	9/21/2008 6:10 AM	0.0							
Sample 1 Parsl	Pest carrot.D	Sample		9/21/2008 7:00 AM	0.0							
Sample 3 Carrot	Pest parsley.D	Sample		9/21/2008 7:24 AM	0.0							

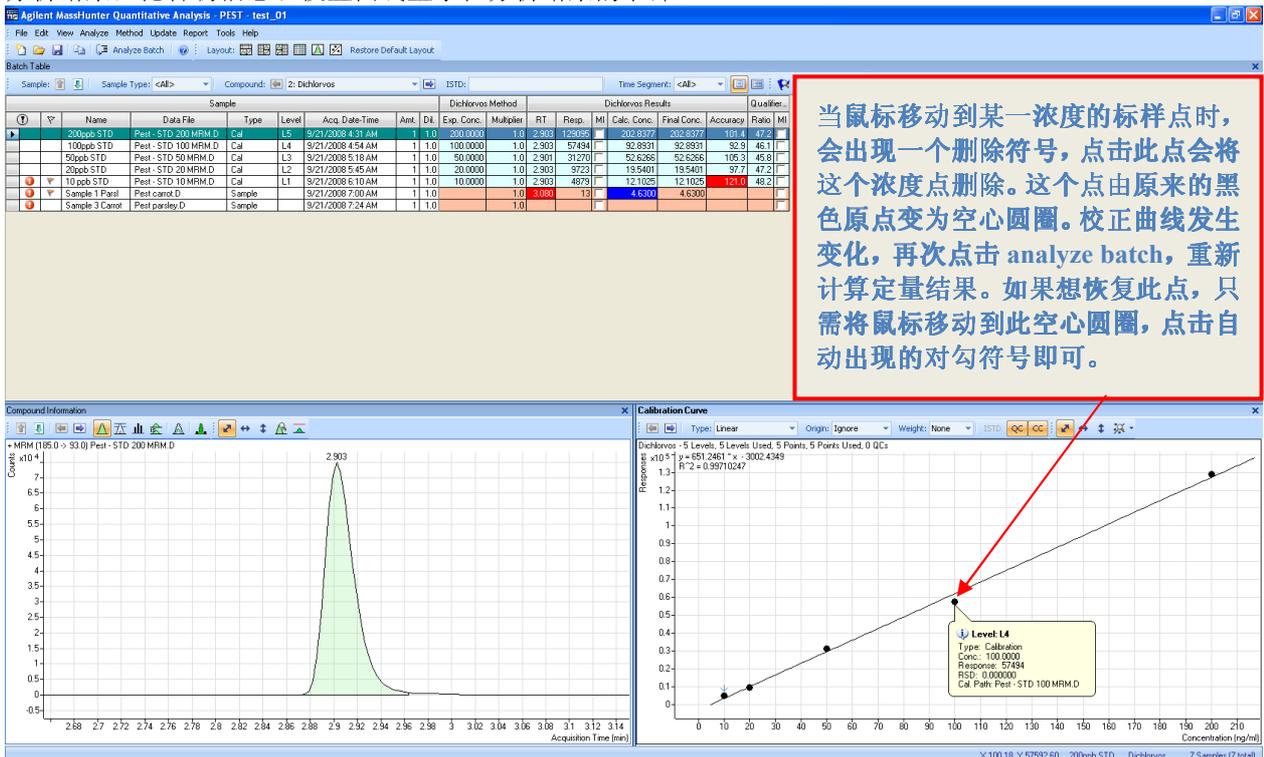
上面错误信息显示Dilution factor数值错误。Dilution factor意为稀释因子，数值应该为正数，通常为1。

在上面列表菜单“Acq.Date-Time”上点击右键，在Add Column下选择Dil.再次同样操作添加Amt.然后将新加列中的所有数值修改为1。



Sample						isofenphos-methyl M...		isofenphos-methyl Results						
Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Amt.	Dil.	Exp. Conc.	Multiplier	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy
200ppb STD	Pest - STD 200 MRM.D	Cal	L5	9/21/2008 4:31 AM	1	1.0	200.0000	1.0	1.0					
100ppb STD	Pest - STD 100 MRM.D	Cal	L4	9/21/2008 4:54 AM	1	1.0		1.0	1.0					
50ppb STD	Pest - STD 50 MRM.D	Cal	L3	9/21/2008 5:18 AM	1	1.0		1.0	1.0					
20ppb STD	Pest - STD 20 MRM.D	Cal	L2	9/21/2008 5:45 AM	1	1.0		1.0	1.0					
10 ppb STD	Pest - STD 10 MRM.D	Cal	L1	9/21/2008 6:10 AM	1	1.0		1.0	1.0					
Sample 1 Parsl	Pest carrot.D	Sample		9/21/2008 7:00 AM	1	1.0		1.0	1.0					
Sample 3 Carrot	Pest parsley.D	Sample		9/21/2008 7:24 AM	1	1.0		1.0	1.0					

修改完成后，继续点击 Analyze Batch，进行定量计算。检查显示在批处理表（Batch Table）上的批处理分析结果，化合物信息和校正曲线显示在分析结果的下部：



当鼠标移动到某一浓度的标样点时，会出现一个删除符号，点击此点会将这个浓度点删除。这个点由原来的黑色原点变为空心圆圈。校正曲线发生变化，再次点击 analyze batch，重新计算定量结果。如果想恢复此点，只需将鼠标移动到此空心圆圈，点击自动出现的对勾符号即可。

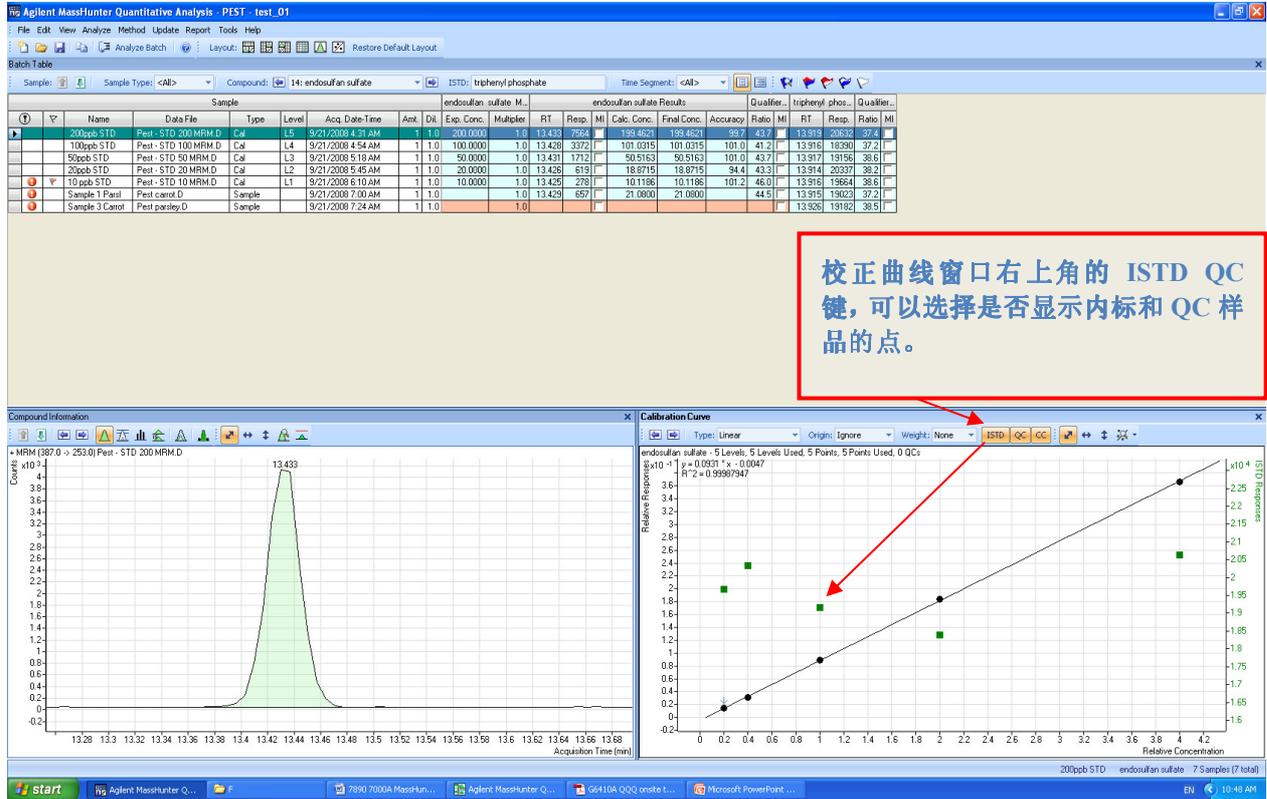
2.3.2 校正曲线的修改

若对某一化合物的 calibration curve 不满意，可以修改 type, origin 和 weight，也相当于修改了定量方法。

或者删除 calibration curve 中某一 level 的点，相关方程和相关系数会发生变化。

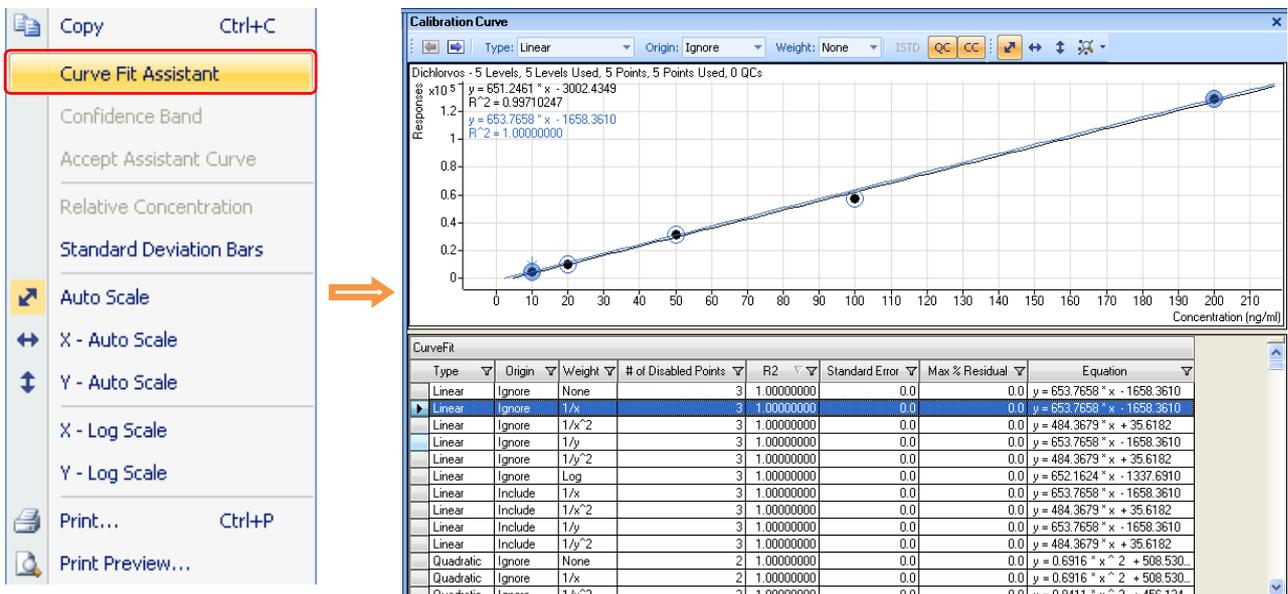
注意修改后要再次 analyze batch，才将新的设置应用到校正计算中，计算结果才会更新。

在使用内标物定量的化合物校正曲线显示窗口，选择 ISTD，则会显示内标的响应（图中绿方点）。从检查各校正曲线的线性来看，使用内标法能够得到更满意的结果。



右键单击校正曲线区域，可以选择显示曲线拟合助手（Curve Fit Assistant）

Curvefit 表格中罗列了各种校正曲线类型，权重和原点位置等，选中某一行，在已有校正曲线区域模拟出该校正曲线（用蓝色表示），如果想更换工作曲线，即接受蓝色的校正曲线，右键单击校正曲线空白区域，选择 Accept Assistant Curve。然后再点击 Analyze Batch，即用新的工作曲线重新计算定量结果。



2.3.3 定量表中的提示符号

Sample							Dichlorvos Method				Dichlorvos Results				Qualifier...		
	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Amt.	Dil.	Exp. Conc.	Multiplier	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI
	200ppb STD	Pest - STD 200 MRM.D	Cal	L5	9/21/2008 4:31 AM	1	1.0	200.0000	1.0	2.	129.		202.8377	202.8377	101.4	47.2	
	100ppb STD	Pest - STD 100 MRM.D	Cal	L4	9/21/2008 4:54 AM	1	1.0	100.0000	1.0	2.	574.		92.8931	92.8931	92.9	46.1	
	50ppb STD	Pest - STD 50 MRM.D	Cal	L3	9/21/2008 5:18 AM	1	1.0	50.0000	1.0	2.	312.		52.6266	52.6266	105.3	45.8	
	20ppb STD	Pest - STD 20 MRM.D	Cal	L2	9/21/2008 5:45 AM	1	1.0	20.0000	1.0	2.	9723.		19.5401	19.5401	97.7	47.2	
	10 ppb STD	Pest - STD 10 MRM.D	Cal	L1	9/21/2008 6:10 AM	1	1.0	10.0000	1.0	2.	4879.		12.1025	12.1025	121.0	48.2	
	Sample 1 Parsl	Pest carrot.D	Sample		9/21/2008 7:00 AM	1	1.0		1.0	3.	13		4.6300	4.6300			
	Sample 3 Carrot	Pest parsley.D	Sample		9/21/2008 7:24 AM	1	1.0		1.0								

Quantitation Message(s)
 diazinon: Qualifier M/Z = 167.0: Integrator did not find any peaks
 triflualin: Qualifier M/Z = 276.0: Integrator did not find any peaks

4.6300 4.6300
Outlier(s)
 Dichlorvos: Calculated concentration = 4.6300 is outside the calibrated range [10.0000, 200.0000]

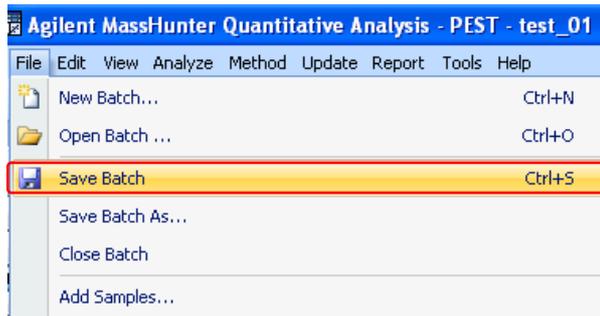
定量提示信息一般提示：定量离子或 qualifier 离子的峰没有找到。对应表格用粉红色表示。

离群数据一般用红色或蓝色表格表示。红色表示数值超过离群上限，蓝色表示数值超过离群下限。当把鼠标移动到有颜色的表格或者提示符号上，相关定量和离群数据的详细信息自动显示。离群数据的范围可以自己按照 2.2.8 中讲述到的方法定义。

2.3.4 保存 batch

打印定量报告前，必须先保存 batch。通过 File 菜单下选择 Save Batch 可保存 Batch。

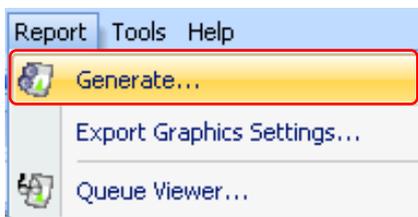
保存的 batch 中含有定量方法，所以再进行相同项目数据的定量分析时，可以在导入数据后，调用该项目中保存的某 batch 的方法，Method---open---open method from existing batch (使用已有的 batch 中的定量方法)，而不用重新建立定量方法。



2.4 定量报告

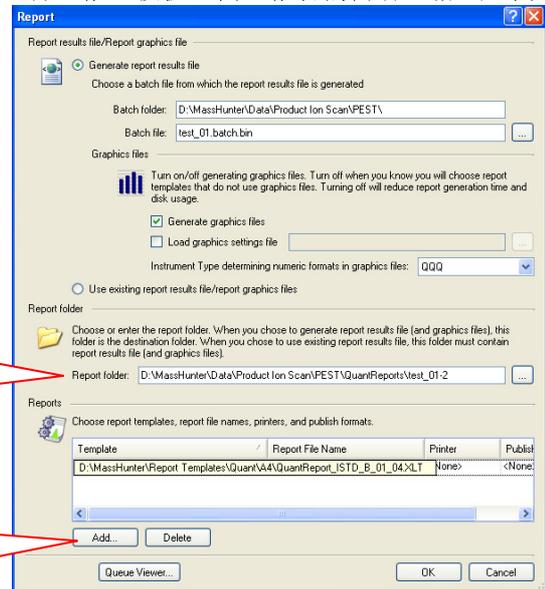
当分析完一批数据，通过选择菜单 Report > Generate 生成报告：

定量软件生成报告都是 Excel 文件（后缀为.xls）。根据选择的报告模板不同，报告的内容和格式不同。



Report folder, 软件自动在此路径下，生成该批数据文件的定量报告文件夹，并且每次自动计数，不会覆盖。

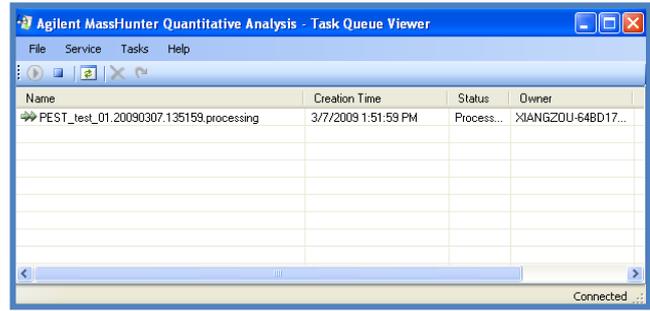
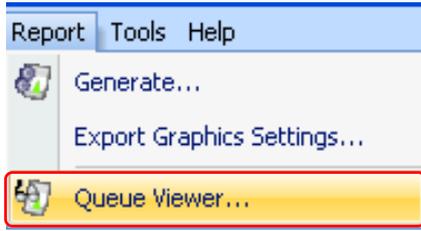
点 Add 选择报告模板，软件自带的模板包括定量报告模板和定性报告模板，并根据纸型（A4 或 Letter）可进行选择。



选择生成报告后，打开 Queue Viewer 监测报告的进度。

注意打开 queue viewer 后，报告才真正的开始产生。

在报告过程没有完全结束前（status 中显示为 processing），不要打开报告和该模板。



产生的报告存于设定的报告存储路径下，打开后如下图：

1、 Summary

Batch Info	
Batch Data Path	D:\MassHunter\Data\Product Ion Scan\PEST\QuantResults\test_01.batch.bin
Analysis Time	3/7/2009 1:16 PM
Report Time	3/7/2009 4:50 PM
Last Calib Update	3/7/2009 1:16 PM
Analyst Name	Administrator
Reporter Name	Administrator
Batch State	Processed

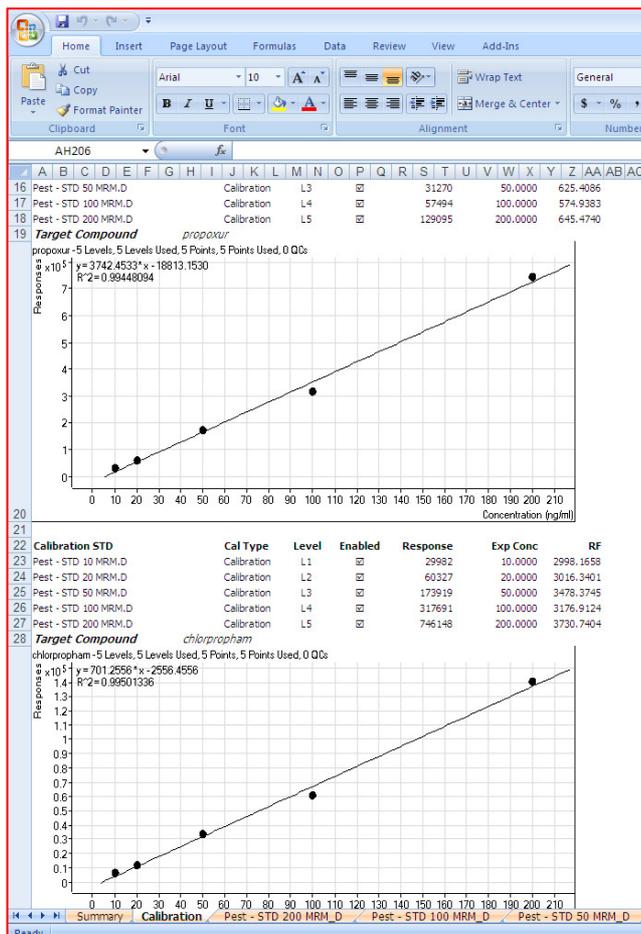
Data File	Sample Name	Position	Volume	Level	Sample Type	Acq Method File
Pest - STD 200 MRM.D	200ppb STD	1	0.0000	L5	Calibration	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest - STD 100 MRM.D	100ppb STD	2	0.0000	L4	Calibration	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest - STD 50 MRM.D	50ppb STD	3	0.0000	L3	Calibration	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest - STD 20 MRM.D	20ppb STD	4	0.0000	L2	Calibration	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest - STD 10 MRM.D	10 ppb STD	5	0.0000	L1	Calibration	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest carrot.D	Sample 1 Parsl	7	0.0000		Sample	2xpest_MRM-BR-Final.M
Pest parsley.D	Sample 3 Carrot	8	0.0000		Sample	2xpest_MRM-BR-Final.M

Target Compound		Dichlorvos						
Data File	Compound	ISTD	Exp Conc	Response	ISTD Resp	Resp Ratio	Final Conc	Accuracy
Pest - STD 200 MRM.D	Dichlorvos		200.0000	129095		0.0	202.8377	101.4
Pest - STD 100 MRM.D	Dichlorvos		100.0000	57494		0.0	92.8931	92.9
Pest - STD 50 MRM.D	Dichlorvos		50.0000	31270		0.0	52.6266	105.3
Pest - STD 20 MRM.D	Dichlorvos		20.0000	9723		0.0	19.5401	97.7
Pest - STD 10 MRM.D	Dichlorvos		10.0000	4879		0.0	12.1025	121.0
Pest carrot.D	Dichlorvos			13		0.0	4.6300	

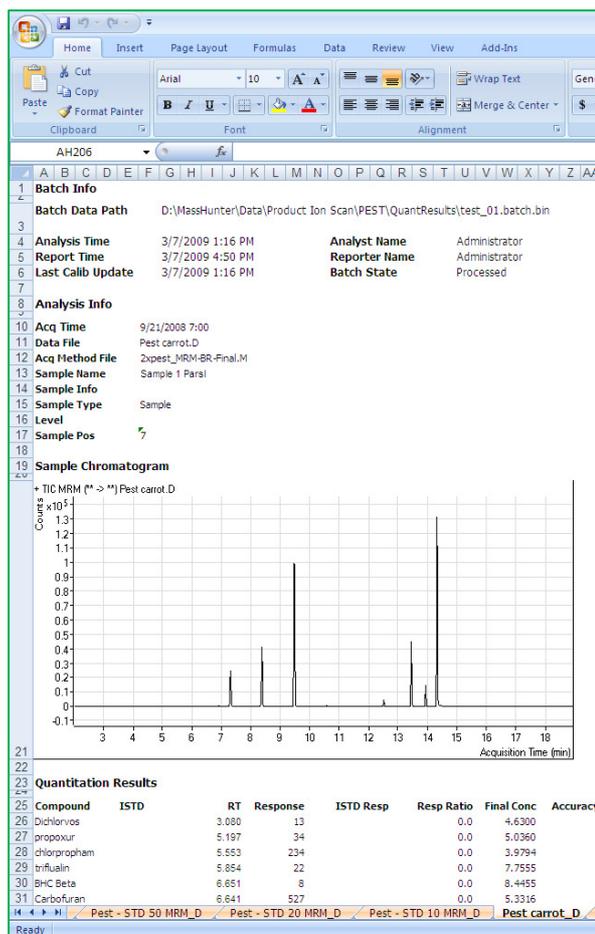
Target Compound		propoxur						
Data File	Compound	ISTD	Exp Conc	Response	ISTD Resp	Resp Ratio	Final Conc	Accuracy
Pest - STD 200 MRM.D	propoxur		200.0000	746148		0.0	204.4010	102.2
Pest - STD 100 MRM.D	propoxur		100.0000	317691		0.0	89.9155	89.9
Pest - STD 50 MRM.D	propoxur		50.0000	173919		0.0	51.4988	103.0
Pest - STD 20 MRM.D	propoxur		20.0000	60327		0.0	21.1465	105.7
Pest - STD 10 MRM.D	propoxur		10.0000	29982		0.0	13.0382	130.4
Pest carrot.D	propoxur			34		0.0	5.0360	
Pest parsley.D	propoxur			421		0.0	5.1394	

Target Compound		chlorpropham						
Data File	Compound	ISTD	Exp Conc	Response	ISTD Resp	Resp Ratio	Final Conc	Accuracy
Pest - STD 200 MRM.D	chlorpropham							

2、Calibration



3、各数据结果



后面依次是 Batch 里面各数据的定量报告。

如果对结果感到满意，可以根据实际要求，在 Excel 报告文件的不同工作表 summary, calibration 或数据文件中打印报告。

在 summary 工作表打印报告，只有列表和定量表，没有校正曲线和谱图。

在 calibration 工作表打印报告，含有校正曲线和标样信息。

在各数据文件工作表打印报告，含有该样品各目标化合物的定量结果，色谱图和质谱图。

*****The End*****

***注意:

安捷伦公司对本教材可能存在的错误及其后果不承担任何法律责任，我们会适时推出新版本的培训教材，恕不另行通知。