

Thermo

MetQuest

版本 1.2

用户手册

XCALI-97412 修订版 A

2012 年 5 月



© 2012 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

MetQuest、Exactive、Q Exactive、Exactive Plus、Transcend、Aria、LTQ Orbitrap、Foundation 和 DCMS^{Link} 均为商标。Accela、LTQ、UltiMate 和 Xcalibur 均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标。

下列是在美国和其它国家的注册商标：Microsoft、Windows 和 Excel 是 Microsoft Corporation 的注册商标。Adobe 和 Acrobat 是 Adobe Systems Incorporated 的注册商标。Agilent 是 Agilent Technologies Inc. 的注册商标。PAL 是 CTC Analytics AG 的商标。

Thermo Fisher Scientific Inc. 为购买产品的客户提供本文档，供其在操作产品时参考。本文档受版权保护，未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 书面许可，严禁复制本文档或本文档的任何部分。

本文档的内容可能随时更改，恕不另行通知。本文档中的所有技术信息仅供参考。本文档中的系统配置和规格将取代购买者先前获得的所有信息。

Thermo Fisher Scientific Inc. 不保证本文档的完整性和准确性，而且对于可能因使用本文档（即使是在正确遵循本文档中的说明信息的情况下）而导致的任何错误、疏忽、损害或损失，Thermo Fisher Scientific Inc. 概不负责。

本文档不是 Thermo Fisher Scientific Inc. 和购买者之间的销售合同的一部分。任何情形下，都不得使用本文档来取代或修改任何“销售条款与条件”，若两份文档信息发生冲突，则以“销售条款与条件”中的信息为准。

发行历史：MetQuest，版本 1.0，2011 年 12 月；版本 1.1，2012 年 4 月；版本 1.2，2012 年 5 月

软件版本：Thermo Foundation 2.0 SP1；Thermo LC Devices 2.5 SP2 及以后版本

仅供研究使用。不可用于诊断。

目录

前言	vii
相关文档	viii
系统要求	ix
获得许可证	x
获取新许可码	x
安装新许可码	xi
特殊注意事项	xi
联系我们	xii
第 1 章 使用 MetQuest 应用程序	1
使用不同工作流程区域	2
应用程序如何找峰	4
第 2 章 开始使用 MetQuest	5
定义组和样品信息	6
导入一个样品列表文件	7
输入样品信息	7
指定配置信息	9
提交实验并查看结果	10
第 3 章 定义样品信息以便采集	13
定义样品信息	14
使用应用程序定义组信息	16
管理组	16
定义组的实验信息	17
识别所用元素	20
手动定义样品信息	23
导入包含组和样品信息的文件	26
配置实验	27
设置报告选项	28
指定配置选项	29
指定仪器方法	29
定义采集参数	30
指定质量数容许偏差值	31
提交和查看实验	32
使用样品表列	33

第 4 章	使用处理方法	37
	创建处理方法	38
	设置代谢物检索参数	38
	定义控制比较值.....	39
	定义保留时间范围.....	42
	指定预计代谢物.....	42
	指定内标和元素组成设置	44
	定义内标.....	45
	设置总面积选项.....	46
	定义元素组成值.....	47
	修改高级谱图拟合值.....	50
	定义峰容许标准.....	51
	保存处理方法	51
	修改处理方法	52
第 5 章	处理已采集的数据	53
	利用 MetQuest 应用程序处理采集数据	54
	利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据	55
	处理全部实验	55
	处理部分实验	57
	利用 .sld 文件处理采集数据.....	59
	利用 Xcalibur 采集的原始文件处理数据.....	61
第 6 章	查看采集和处理状态	63
	查看采集状态	63
	查看处理信息	67
	查看 Processing Display 区域的信息.....	67
	停止处理活动	69
	查看处理日志信息	70
	理解错误处理	71
第 7 章	从应用程序查看结果	73
	利用 Data Review 查看和修改测试结果	74
	查看组分结果	74
	查看 Component Review 表	76
	查看时间过程图.....	82
	查看提取离子色谱图 (XIC)	83
	查看 MS/MS 或 AIF 扫描	85
	查看元素组成信息	86
	查看元素组成结果.....	87
	查看全 MS 扫描显示	88
	在 Data Review 中处理组分结果	89
	在 Data Review 中过滤组分.....	90
	在 Data Review 中对元素进行排序.....	91
	改变组分	93
	排除单个样品.....	94
	从组中排除时间点.....	95
	从实验的所有组中排除时间点.....	96
	从组中排除时间过程.....	97

	排除重复样品.....	98
	手动积分组分.....	101
	保存 Data Review 中的修改.....	102
	定义 Data Review 页面的报告选项.....	102
	查看实验日志结果.....	103
	查看实验报告.....	104
	查看总结报告.....	106
	查看详细报告.....	110
	处理实验 CSV 文件.....	113
	打印报告.....	116
第 8 章	配置仪器以便采集.....	117
	配置仪器.....	117
	为系统配置添加硬件设备.....	118
	从系统配置移除硬件设备.....	120
	使用仪器方法.....	121
	创建仪器方法.....	121
	修改仪器方法.....	123
	导入现有仪器方法.....	123
第 9 章	使用模板.....	125
	利用组和样品信息创建文件.....	126
	使用代谢物修饰列表进行处理.....	129
	翻译术语表.....	131
	索引.....	137

前言

本手册描述如何使用 Thermo MetQuest™ 代谢稳定性筛选软件处理来自如下 Thermo Scientific 仪器：Exactive™、Exactive Plus™、Q Exactive™ 和 Orbitrap™ 的高分辨精确质量数据，获得母体药物的代谢信息。处理全扫描、MS/MS 扫描和 AIF（All Ions Fragmentation，所有离子裂解）数据时，MetQuest 应用程序提供有关母体药物及其代谢物的相对定量和定性信息。该应用程序为制药工业中需要高通量筛选大量候选药物的客户提供支持。

目录

- [相关文档](#)
- [系统要求](#)
- [获得许可证](#)
- [特殊注意事项](#)
- [联系我们](#)

❖ 若要对文档或 Help 提出更改建议

单击下面的链接完成有关本文档的简短调查。
在此先对您的帮助表示感谢。




相关文档

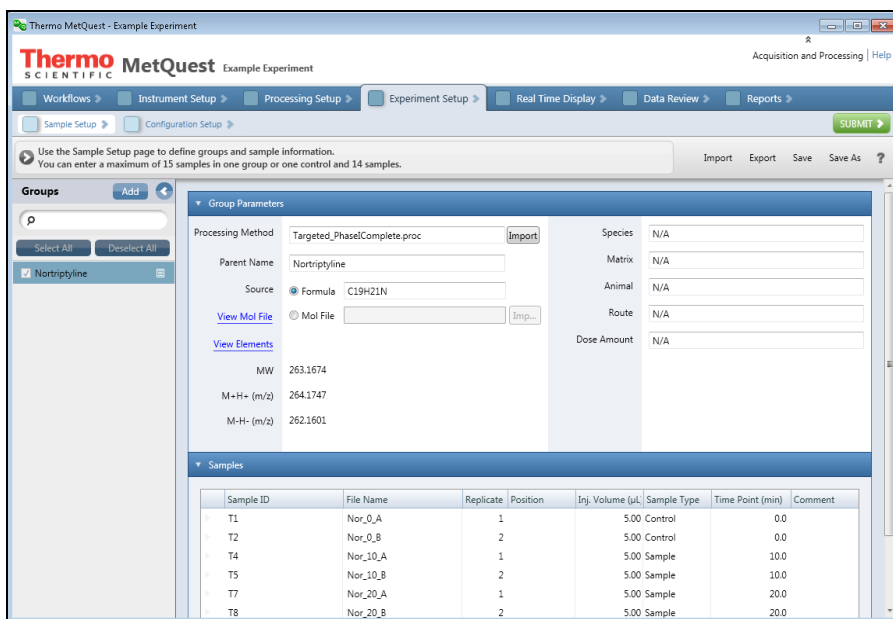
除了 *MetQuest User Guide* (*MetQuest 用户手册*)，MetQuest 应用程序还包括了 PDF 格式的 *MetQuest Quick Start Guide* (*MetQuest 快速入门手册*)、系统帮助以及提供特定产品信息的信息栏。

❖ 若要查看 Communicator 栏


在 MetQuest 窗口中，将光标放在任何域或信息栏内，所显示信息包括有效值和该域的默认值。

Communicator（通信）栏也显示关于整个视图的信息。更多信息可单击  打开 Help（帮助）。

Communicator 栏



❖ 若要打开 Help

- 从 MetQuest 窗口选择 **Help**（帮助） > **MetQuest Help**（MetQuest 帮助）。
- 若要打开特定窗口或对话框的帮助，单击  或按下 F1 获得设置参数的信息。

❖ 若要查看产品手册

转至 **Start**（开始） > **Programs**（程序） > **Thermo MetQuest** > **Manuals**（手册）。

系统要求

系统必须满足以下最低要求。为了安装并获得 MetQuest 应用程序的许可，用户必须是计算机的系统管理员。

重要信息 该软件专为使用 US-English 版本 Microsoft™ Windows™ 7 或 XP 操作系统而设计。Thermo Fisher Scientific 及其信息合作伙伴不为使用其他版本 Microsoft Windows 操作系统的用户提供支持。

系统	要求
数据系统计算机	<ul style="list-style-type: none">• 2 GHz 处理器，具有 2 GB RAM，32-bit 系统或 64-bit 系统• DVD/CD-ROM 驱动器• 视频卡和显示器分辨率（XGA）达到 1280×1024• 计算机硬盘至少 75 GB，C: 驱动盘至少 30 GB
仪器（支持或所需）	<ul style="list-style-type: none">• 质谱仪：Exactive、Exactive Series 2.1（Exactive Plus 和 Q Exactive）、LTQ™ Orbitrap™• 支持采集的 LC 设备：<ul style="list-style-type: none">– 泵：Accela™ 泵、Accela 600 泵、Accela 1250 泵、Agilent™ 1200 Bin 泵– 自动进样器：Accela AS、Open Accela AS、CTC Thermo PAL™ AS、Agilent 1200 AS– PDA：Accela PDA、Agilent 1200 DAD– 组合：Transcend™ TXL-1（Aria™ MX V.）、UltiMate™ 3000（DCMSLink™）
软件	<ul style="list-style-type: none">• 操作系统：<ul style="list-style-type: none">– 带 Service Pack 3 的 Microsoft™ Windows™ XP Professional–或–– 带 Service Pack 1 的 Windows 7 Professional• Microsoft .NET 3.5、SP1 和 Microsoft .NET Framework 4 Extended• Thermo Foundation™ 2.0 SP1• Microsoft Office 2010• Adobe™ Acrobat™ 10.1• （可选，但是推荐）Thermo Xcalibur™ 数据系统 2.2 SP1• 硬件驱动软件：<ul style="list-style-type: none">– Exactive 驱动软件 1.1 SP4 或更高版本– Exactive Series 2.1（用于 Exactive Plus 和 Q Exactive）– 对于 LTQ 组合式（LTQ-Orbitrap/FT）家族，安装 LTQ 版本 2.7– LC Devices 2.5 SP2；若使用 Xcalibur™ 进行采集，则采用版本 2.6 用于 Waters Acquity

获得许可证

MetQuest 代谢稳定性筛选软件需要一个许可证。根据 DVD 上的安装说明安装软件。然后使用这些步骤从 Thermo Fisher Scientific 获得一个新的许可码（参阅第 x 页的“获取新许可码”），并在收到后安装新的许可码（参阅第 xi 页的“安装新许可码”）。

获取新许可码

若要获得许可码，必须成为计算机的系统管理员。根据步骤生成一个未激活的许可证，将信息发送到 Thermo Fisher Scientific 的许可部门获得一个激活的许可证。

❖ 若要获取许可码

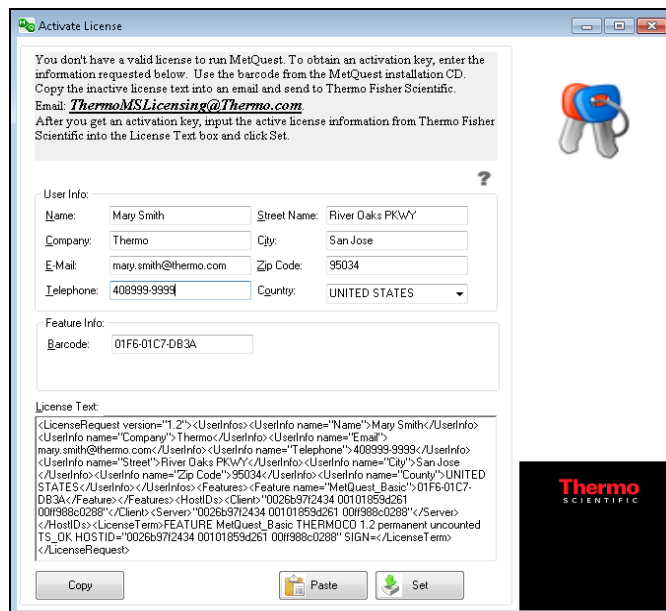
1. 若要启动 MetQuest 应用程序，单击  或选择 **Start（开始） > All Programs（所有程序） > Thermo MetQuest > MetQuest**。

每次在试用期启动程序时，系统会通知你试用期剩余的天数并提供激活许可证的选项。

2. 选择 **Activate Now（马上激活）** 应用许可证或选择 **Activate Later（以后激活）**。

如果试用期已满，单击 **Activate Later** 后应用程序关闭。

在选择 **Activate Later** 之后，如果想要获得一个许可码，选择 **Help（帮助） > About MetQuest（关于 MetQuest）** 显示 About MetQuest 对话框。单击 **Activate Now**。



Activate License

You don't have a valid license to run MetQuest. To obtain an activation key, enter the information requested below. Use the barcode from the MetQuest installation CD. Copy the inactive license text into an email and send to Thermo Fisher Scientific.
Email: ThermoMSLicensing@Thermo.com
After you get an activation key, input the active license information from Thermo Fisher Scientific into the License Text box and click Set.

User Info:

Name: May Smith Street Name: River Oaks PKWY
Company: Thermo City: San Jose
E-Mail: may.smith@thermo.com Zip Code: 95034
Telephone: 408999-9999 County: UNITED STATES

Feature Info:

Barcode: 01F6-01C7-DB3A

License Text:

```
<LicenseRequest version="1.2"><UserInfos><UserInfo name="Name">May Smith</UserInfo>
<UserInfo name="Company">Thermo</UserInfo><UserInfo name="Email">
may.smith@thermo.com</UserInfo><UserInfo name="Telephone">408999-9999</UserInfo>
<UserInfo name="Street">River Oaks PKWY</UserInfo><UserInfo name="City">San Jose
</UserInfo><UserInfo name="Zip Code">95034</UserInfo><UserInfo name="County">UNITED
STATES</UserInfo></UserInfos><Features><Feature name="MetQuest_Basic">01F6-01C7-
DB3A</Feature></Features><HostID><Client>"0026b972434 00101859d261
00f988c0288"</Client><Server>"0026b972434 00101859d261 00f988c0288"</Server>
</HostID><LicenseTerm>FEATURE MetQuest_Basic THERMODOC 1.2 permanent uncounted
TS_OK HOSTID="0026b972434 00101859d261 00f988c0288" SIGN=</LicenseTerm>
</LicenseRequest>
```

Copy Paste Set

3. 填充所有域。

应用程序根据域信息生成许可请求。

4. 条形码位于 MetQuest CD 盒的背面。在 Feature Info（特征信息）区域内输入条形码。
5. 选择 **Copy（复制）** 将许可码复制到剪切板。

6. 打开电子邮件信息然后将剪切板内的信息粘贴到邮件正文。将这封邮件发送到 ThermoMSLicensing@thermo.com。

当 Thermo Fisher Scientific 客户支持中心发送新的许可码给您时，参阅“[安装新许可码](#)。”

安装新许可码

接到新的许可码后，启动应用程序安装这个编码。

❖ 若要安装许可码

1. 单击计算机桌面上的 。
如果没有许可证，应用程序显示一个提醒通知。
2. 单击 **Activate Now** 打开 MetQuest License（MetQuest 许可证）对话框。
如果试用期仍然有效，若要从应用程序进入 MetQuest License 对话框，可选择 **Help > About MetQuest** 以显示 About MetQuest 对话框。单击 **Activate Now**。
3. 在 License（许可证）框内粘贴新的许可码。
4. 单击 **Set（设置）** 激活 MetQuest 应用程序。
5. 关闭 MetQuest License 对话框。

特殊注意事项

确保遵循本手册中发布的事先声明。在方框内出现的安全和其他特别注意事项。

特殊注意事项包括下列内容：

重要信息 强调防止软件损害、数据丢失或无效测试结果必需的信息；或可能包含获得系统最佳性能的重要信息。

注意 强调普遍关注的信息。

提示 强调能够帮助简化工作的信息。

联系我们

可以通过多种方式联系 Thermo Fisher Scientific，获取所需信息。

❖ 若要联系技术支持中心

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
电子邮件	us.techsupport.analyze@thermofisher.com
知识库	www.thermokb.com

若要下载更新和配套软件，访问：mssupport.thermo.com。

❖ 若要联系客户服务中心，获取订购信息

电话	800-532-4752
传真	561-688-8731
电子邮件	us.customer-support.analyze@thermofisher.com
网站	www.thermo.com/ms

❖ 若要获得本地销售或服务联系信息

转至 www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus。

❖ 若要从互联网复制手册

转至 mssupport.thermo.com，同意相关条款和条件，然后单击窗口左侧空白处的 **Customer Manuals**（用户手册）。

❖ 若要对文档或 Help 提出更改建议

- 在 www.surveymonkey.com/s/PQM6P62 中在线填写问卷调查。
- 向技术出版编辑发送电子邮件，邮箱地址为 techpubs-lcms@thermofisher.com。

使用 MetQuest 应用程序

MetQuest 代谢物稳定性筛选软件适用于具有一定液相色谱 / 质谱仪 (LC/MS) 经验的用户，是一个数据采集、处理和报告系统。

本章为 MetQuest 应用程序提供一个基本概述。



目录

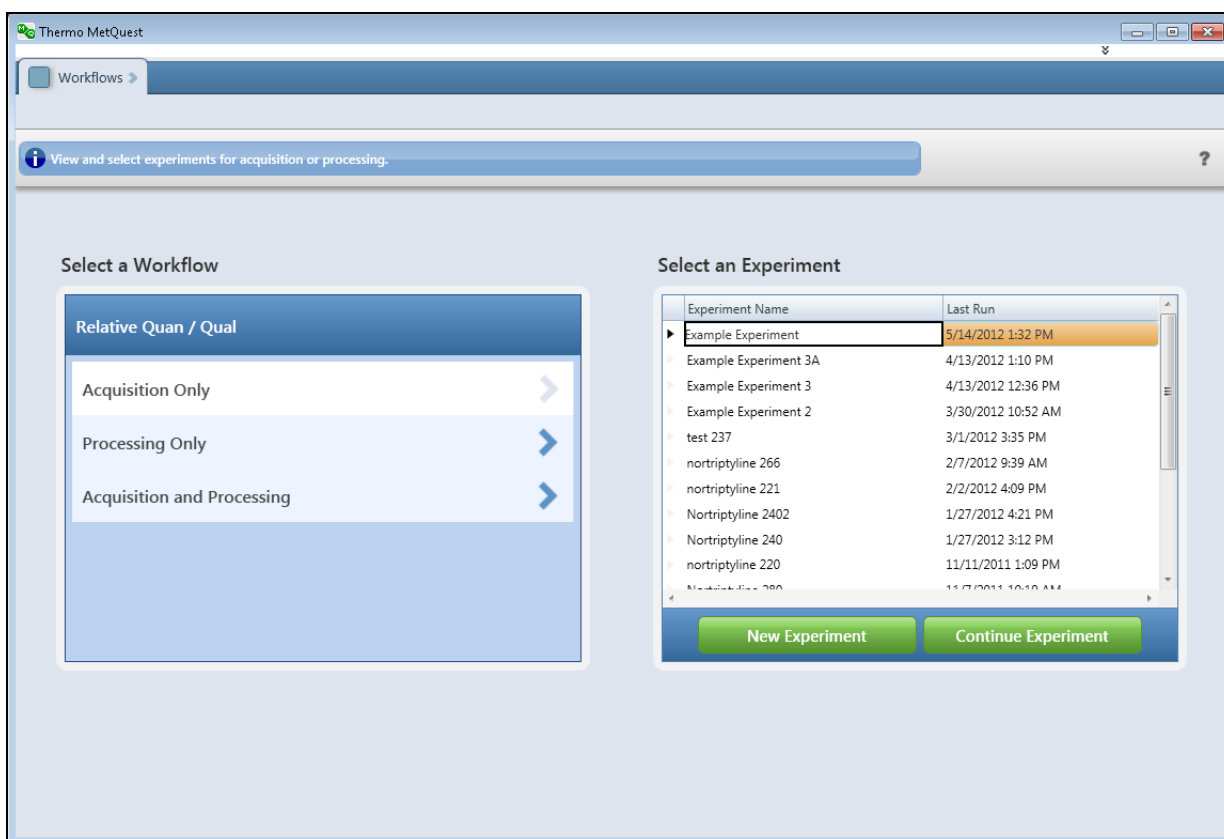
- [使用不同工作流程区域](#)
- [应用程序如何找峰](#)

使用不同工作流程区域

本部分说明如何使用 MetQuest 应用程序的主要工作流程。（相对定量 / 定性实验可以使用下列工作流程：Acquisition Only（仅采集）、Processing Only（仅处理）和 Acquisition and Processing（采集和处理）。）使用 Relative Quan/Qual（相对定量 / 定性）实验监测候选药物的代谢稳定性并识别假定的代谢物。Relative Quan/Qual 对于快速评估母体药物的药物代谢动力学性质非常有用。

❖ 若要打开 MetQuest 应用程序

1. 双击  打开 MetQuest 应用程序。
2. 若要在应用程序窗口中为数据提供更多空间，点击  隐藏 Thermo 标题栏。



3. 从 Workflows（工作流程）视图的列表选择一个类型。从 **Acquisition Only**、**Processing Only** 或 **Acquisition and Processing** 中选择。

表 1 列出每个工作流程的功能。

表 1. 工作流程的功能

工作流程	描述
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">Acquisition Only</div>	<p>打开 Acquisition Only 工作流程区域，可执行下列功能：</p> <ul style="list-style-type: none"> • Instrument Setup（仪器设置）：创建、修改和保存仪器方法。参阅第 121 页的“使用仪器方法”。 • Experiment Setup（实验设置）：创建、修改和保存样品、组和配置信息，以便进行采集。参阅第 14 页的“定义样品信息”。 • Real Time Display（实时显示）：查看和修改实时采集。参阅第 63 页的“查看采集状态”。
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">Processing Only</div>	<p>打开 Processing Only 工作流程区域，可执行下列功能：</p> <ul style="list-style-type: none"> • Processing（处理）：创建、修改和保存处理方法。参阅第 38 页的“创建处理方法”。有关先前采集的实验，参阅第 53 页的“处理已采集的数据”。 • Experiment Setup：创建、修改和保存样品和配置信息，以便进行处理。若只进行处理，必须已经具有采集数据文件。参阅第 14 页的“定义样品信息”。 • Processing Status Display（处理状态显示）：查看状态，包括当 MetQuest 应用程序处理采集数据时发生的处理错误和错误日志。参阅第 67 页的“查看处理信息”。 • Reports（报告）：查看处理实验的报告。参阅第 104 页的“查看实验报告”。
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">Acquisition and Processing</div>	<p>打开 Acquisition and Processing 工作流程区域，可执行下列功能：</p> <ul style="list-style-type: none"> • Instrument Setup：创建、修改和保存仪器方法。参阅第 121 页的“使用仪器方法”。 • Processing：创建、修改和保存处理方法。参阅第 38 页的“创建处理方法”。 • Experiment Setup：创建、修改和保存样品、组、实验和配置信息，以便进行采集。 • Real Time Display：查看和修改实时采集。参阅第 63 页的“查看采集状态”。 • Processing Status Display：查看状态，包括当 MetQuest 应用程序处理采集数据时发生的处理错误和错误日志。参阅第 67 页的“查看处理信息”。 • Reports：查看处理实验的报告。参阅第 104 页的“查看实验报告”。 <p>单击顶部选项卡之一，以从一个区域转至另一个区域。</p>

应用程序如何找峰

MetQuest 应用程序在目标工作流程中为母体药物的预计代谢物处理相对定量 / 定性数据。每个实验组具有单个母体药物组和一个定义单内标（若已定义）的处理方法。应用程序执行下列操作：

- 在 Processing Setup（处理设置）> Metabolite Options（代谢物选项）> Expected Metabolites（预计代谢物）中定义预计代谢物列表，根据这个列表创建理论 m/z 值列表。预计代谢物列表包括希望找到的代谢物的名称、分子式变化和质量数变化。若要使用模板创建预计代谢物列表，参阅[使用代谢物修饰列表进行处理](#)。
- 应用程序使用该列表检测每个 m/z 值的峰，并为用于确定峰面积的峰建模。应用程序还尝试正确分离洗脱时间极其相近的同量异序化合物，为每个峰单独建模。
- 对于已检测峰，应用程序在 Data Review（数据查看）视图中显示保留时间、 m/z 值、峰面积、元素组成、全扫描质谱数据以及合适的 MS/MS 扫描数据。

开始使用 MetQuest

使用 MetQuest 应用程序采集全扫描和 AIF 扫描高分辨准确质量数据，以自动生成报告。若要利用本章内的步骤采集和处理样品数据，必须已经创建处理方法和仪器方法。

目录

- 定义组和样品信息
- 指定配置信息
- 提交实验并查看结果

定义组和样品信息

在 Sample Setup（样品设置）视图内定义组和样品信息。

❖ 若要打开 Sample Setup 视图

1. 从 Workflows（工作流程）视图选择一个工作流程类型（选择 **Acquisition and Processing**（采集和处理）采集和处理样品数据）。
2. 单击 **Experiment Setup**（实验设置）选项卡打开 Experiment Setup 视图。

如果已经打开了一个实验，应用程序会提示用户保存或放弃修改。Experiment Setup 选项卡有两个部分：Sample Setup 和 Configuration Setup（配置设置）。Sample Setup 区域有三个主要部分：Groups（组）、Group Parameters（组参数）和 Samples（样品）。在这三个部分中添加信息，运行 Acquisition and Processing 工作流程。

Thermo MetQuest - Example Experiment

Thermo MetQuest SCIENTIFIC Example Experiment

Acquisition and Processing | Help

Workflows > Instrument Setup > Processing Setup > Experiment Setup > Real Time Display > Data Review > Reports >

Sample Setup > Configuration Setup > SUBMIT >

Use the Sample Setup page to define groups and sample information.
You can enter a maximum of 15 samples in one group or one control and 14 samples. Import Export Save Save As ?

Groups Add <

Select All Deselect All

Norriptyline

Group Parameters

Processing Method Targeted_PhaseIComplete.proc Import

Parent Name Norriptyline

Source Formula C19H21N Mol File Imp...

Species N/A

Matrix N/A

Animal N/A

Route N/A

Dose Amount N/A

MW 263.1674

M+H+ (m/z) 264.1747

M-H- (m/z) 262.1601

Samples

Sample ID	File Name	Replicate	Position	Inj. Volume (µL)	Sample Type	Time Point (min)	Comment
T1	Nor_0_A	1		5.00	Control	0.0	
T2	Nor_0_B	2		5.00	Control	0.0	
T4	Nor_10_A	1		5.00	Sample	10.0	
T5	Nor_10_B	2		5.00	Sample	10.0	
T7	Nor_20_A	1		5.00	Sample	20.0	
T8	Nor_20_B	2		5.00	Sample	20.0	

若要定义组和样品信息，选择下列选项之一：

- **导入一个样品列表文件：** 导入一个具有组和样品信息的 .csv 文件。有关创建 .csv 导入文件的信息，参阅第 126 页的“利用组和样品信息创建文件”。
- **输入样品信息：** 在 Sample Setup 视图中输入实验信息。

导入一个样品列表文件

❖ 若要导入一个包括样品信息的文件进行采集

1. 在 Sample Setup 视图中，单击 Submit（提交）按钮下的 **Import（导入）**，选择一个 **.CSV Sample List（.CSV 样品列表）**，并浏览至包括组和样品信息的文件。
2. 选择文件，然后单击 **Open（打开）**。

若导入一个包括样品信息的文件，MetQuest 应用程序覆盖所有当前显示的组和样品信息。

3. 查看组和样品信息，确保其准确性。

应用程序在导入时、保存前以及提交实验之前确认组和样品信息，在每个步骤提供警告错误。可以在导入文件后继续修改有错误的实验。应用程序防止用户提交或保存有错误的实验。

4. 为每组选择一个处理方法。

输入样品信息

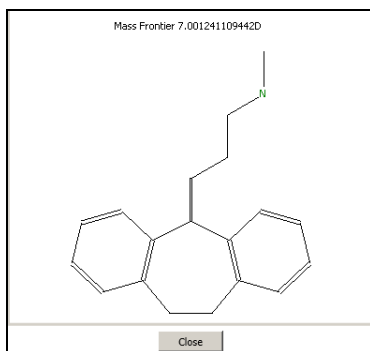
❖ 若要定义每组样品的信息

1. 在 Sample Setup 视图中，在 Groups 区域内选择一个组名，然后定义该组信息。单击 Groups 区域内的 **Add（添加）** 并输入一个新组名，以添加一个组。
2. 在 Group Parameters 区域中单击 **Import** 选择一个定义 MetQuest 应用程序如何处理数据的处理方法。

处理方法定义预期修改列表和内标。若要创建一个处理方法，参阅第 38 页的“[创建处理方法](#)”。

Group Parameters	
Processing Method	Targeted_PhaseIComplete.proc <input type="button" value="Import"/>
Parent Name	Nortriptyline
Source	<input checked="" type="radio"/> Formula C19H21N <input type="radio"/> Mol File <input type="button" value="Import"/>
	View Mol File
	View Elements
MW	263.1674
M+H+ (m/z)	264.1747
M-H- (m/z)	262.1601
Species	N/A
Matrix	N/A
Animal	N/A
Route	N/A
Dose Amount	N/A

3. 在 Parent Name（母体药物名称）框中输入药物名称。只使用字母和数字符号。
4. 若要添加母体药物的分子式，可使用下列方法之一。
 - 如果母体药物具有 .mol 文件，选择 **Mol File（Mol 文件）** 选项并单击 **Import**。选择文件并单击 **Open**，在合适区域显示来自文件的质量数、分子式和其他值。若要查看分子质量和质量数结构，单击 **View Mol File（查看 Mol 文件）** 打开显示框。可以调整显示大小。



- 如果没有 .mol 文件，选择 **Formula**（分子式）选项并在 Formula 框内输入分子式。

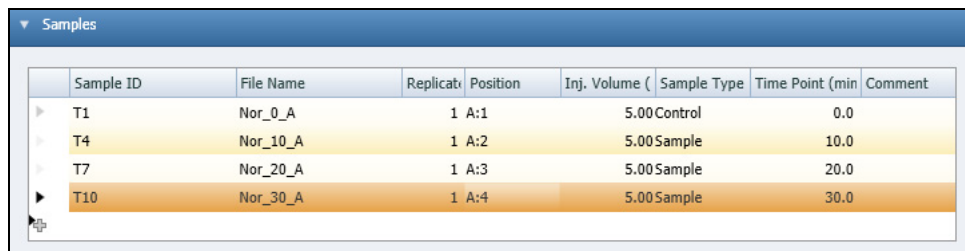
一旦添加分子式，MetQuest 应用程序在 Elements in Use（所用元素）对话框中添加分子式中的所有元素。应用程序计算并显示中性分子量和其他值，例如基于分子式的质子化分子量。有关详细信息，参阅第 20 页的“识别所用元素”。若要查看所用元素，单击 **View Elements**（查看元素）。

5. 根据需要在 Group Parameters 区域内输入其他信息。

应用程序在总结和详细报告中显示 Sample ID（样品识别号）、Replicate Number（重复数）、Species（种类）、Matrix（基质）、Animal#（动物编号）、Route（途径）和 Dose Amount（剂量）值。

6. 在开始采集样品数据之前在 Samples 列表中输入下列所需数据。至少提供一个样品进行数据采集和处理。

若要使用复制或向下填充，参阅第 34 页的“若要复制行内容”或者第 34 页的“使用 Fill Down 在连续行中递增某单元格内容”。



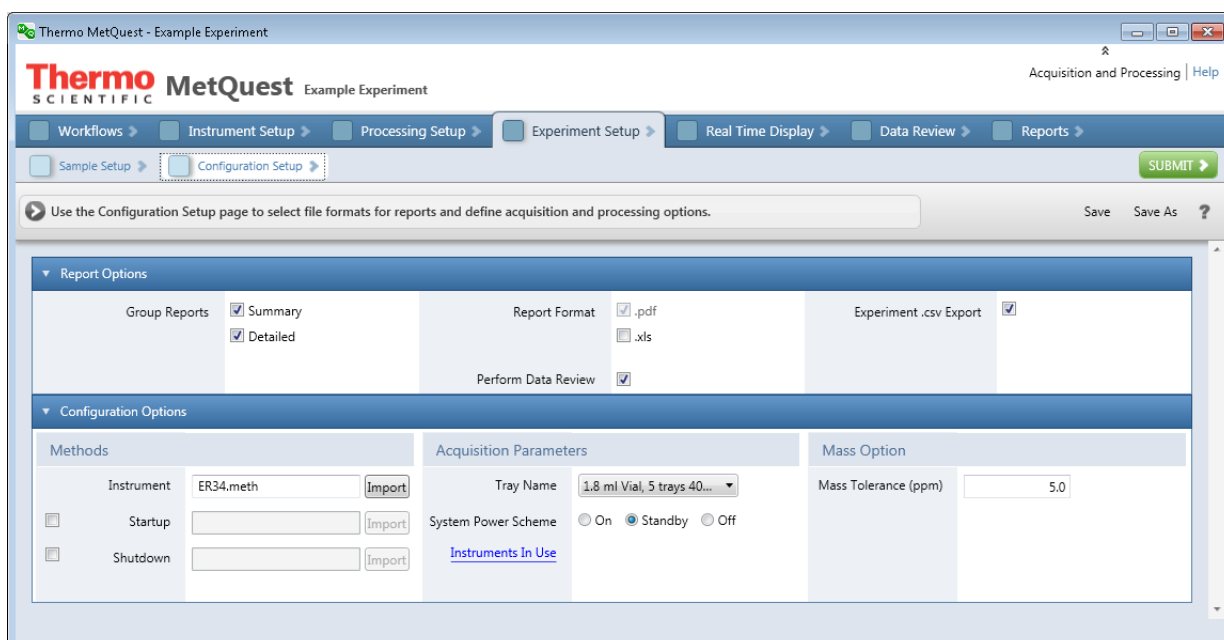
Sample ID	File Name	Replicate	Position	Inj. Volume (µL)	Sample Type	Time Point (min)	Comment
T1	Nor_0_A	1	A:1	5.00	Control	0.0	
T4	Nor_10_A	1	A:2	5.00	Sample	10.0	
T7	Nor_20_A	1	A:3	5.00	Sample	20.0	
T10	Nor_30_A	1	A:4	5.00	Sample	30.0	

- a. 在 Sample ID 列中输入样品识别号。
- b. 在 File Name（文件名）列中为结果输入一个唯一的文件名。如果实验具有重复样品，为每个时间点的重复样品提供一个不同的编号。每个重复系列（每行）可以在时间 T0 处具有自己的控制样品。首个重复系列必须以重复数 1 开始。即使用户删除一个重复系列，重复数必须连续。不要为空白样品定义重复数或时间点。
- c. 在 Position（位置）列输入自动进样器的样品瓶或板位置号。
- d. 在 Inj. Volume（进样体积）列中指定样品的进样体积（单位 µL）。
- e. 定义时间点。不要为空白样品定义时间点。
- f. 定义样品类型。

指定配置信息

❖ 若要指定配置信息

1. 若要选择仪器方法参数，单击 **Experiment Setup** 选项卡然后单击 **Configuration Setup**。

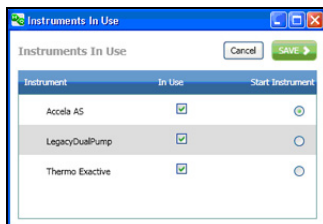


2. 选择报告选项。
3. 在 Report Options（报告选项）区域，选择 **Perform Data Review**（执行数据查看）复选框查看数据结果，并在创建报告之前进行修改。
4. 在 Configuration Options（配置选项）区域中选择一个定义仪器采集参数的仪器方法。
5. 若要使用启动或关闭方法，选择合适的复选框并单击 **Import** 选中并打开方法文件。

对于 Accela、Agilent 1200 和 Accela PDA 自动进样器，托盘类型显示在 Acquisition Parameters（采集参数）区域的 Tray Name（托盘名称）域中。对于支持一种以上已配置托盘类型的自动进样器（Open Accela、CTC Thermo PAL 自动进样器和连接的 UltiMate 3000 (DCMS^{Link})，Tray Name 域显示为 As Configured（如配置）。

6. 若要在处理结束后设置仪器状态，选择下列选项之一：**On**（开机）、**Standby**（待机），或 **Off**（关机）。

- 单击 **Instruments in Use**（所用仪器）。
- 选择用于采集的仪器，并选择一个启动仪器。

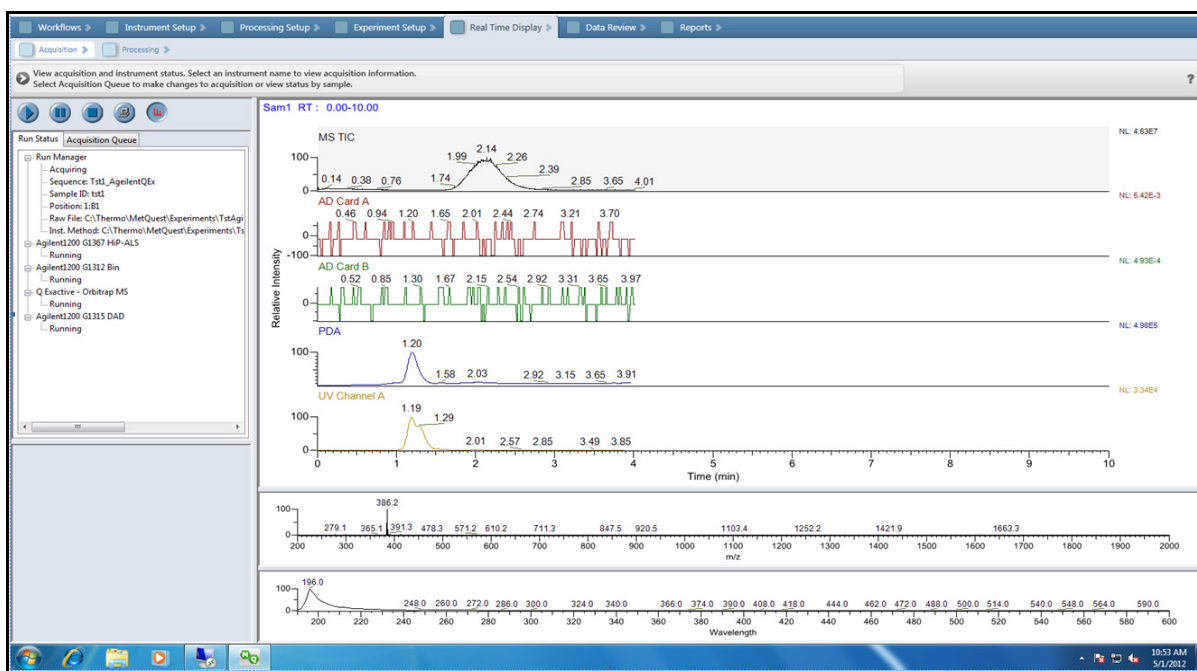


提交实验并查看结果

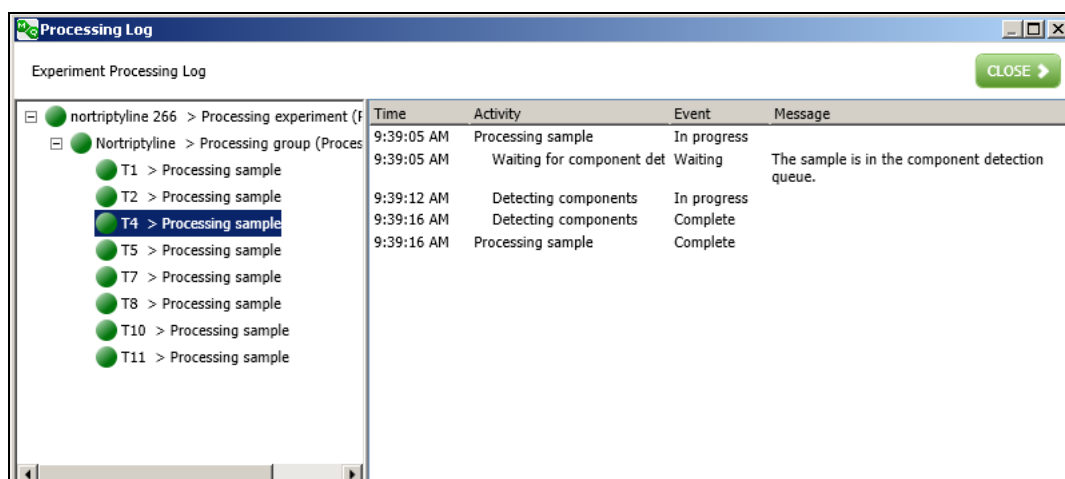
❖ 若要提交实验和查看结果

- 在 Sample Setup 视图中单击 **Submit** 处理样品。
 - 若要提交或保存实验，应用程序提示将序列保存为唯一的名称。

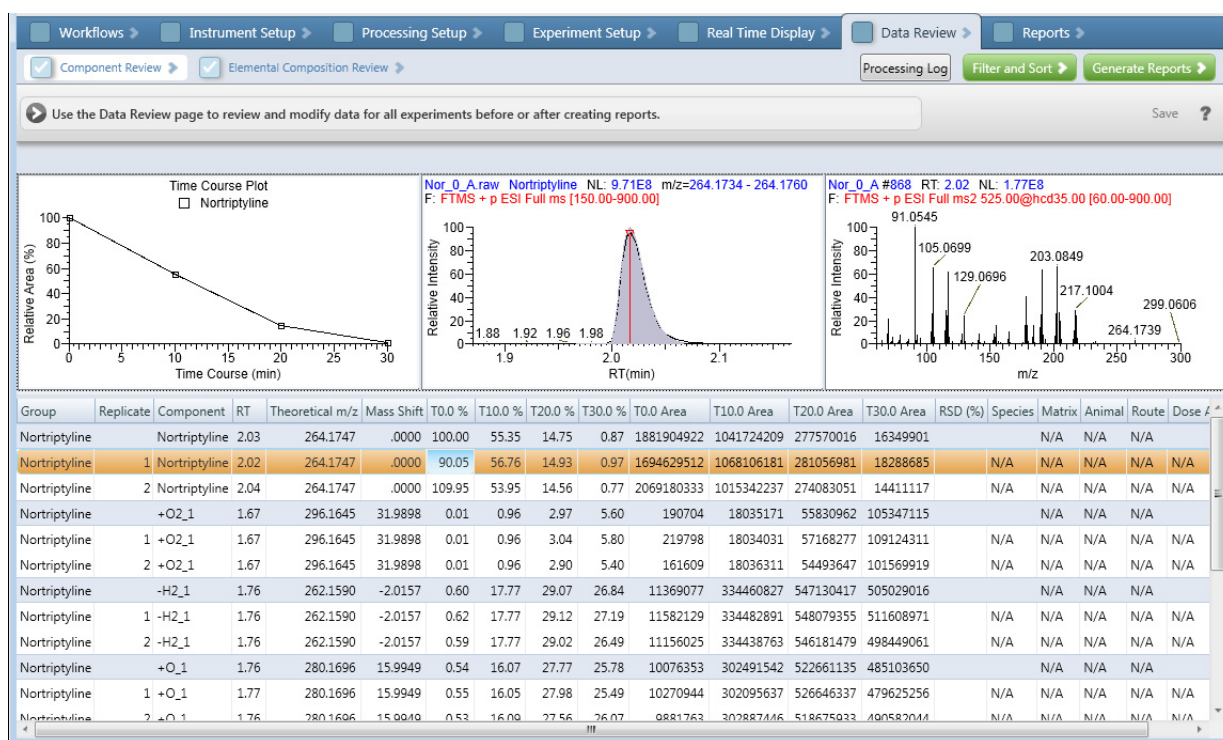
如果样品瓶或板位置或进样体积不正确，应用程序信息栏显示指定有效值范围的信息。
 - 若要查看实时采集和处理状态，单击 **Real Time Display**（实时显示）选项卡。单击 **Acquisition**（采集）选项卡查看实时采集样品数据，以评估采集状态。



单击 **Processing**（处理）查看处理状态和日志信息。

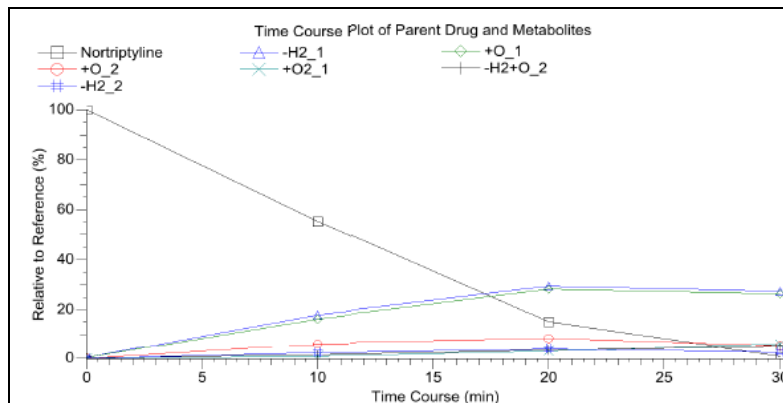


如果在 Report Options 区域选择了 Perform Data Review 复选框，当处理结束后，应用程序提示单击 Data Review（数据查看）选项卡，在此可以过滤或筛选数据。有关处理实验结果的更多信息参阅第 74 页的“利用 Data Review 查看和修改测试结果”。若未选中 Perform Data Review 复选框，应用程序生成用户可以在 Reports（报告）视图中访问的报告。



2. 若要从 Reports 视图查看报告，单击 **Reports** 选项卡，选择一个组并选择总结或详细报告类型。

这个总结报告显示一个显示 / 隐藏图表，以及表格中每个时间点的结果。
有关报告的更多信息，参阅第 104 页的“查看实验报告”。



定义样品信息以便采集

若要创建实验进行采集，可以使用 Acquisition Only（仅采集）或 Acquisition and Processing（采集和处理）工作流程。对于两种工作流程，必须定义样品组信息和仪器方法。对于 Acquisition and Processing 工作流程，还必须指定处理方法。对于 Acquisition Only 工作流程，一旦创建实验，即将样品放入自动进样器，启动采集，无需定义处理方法。

样品信息包括组信息和每组样品列表。样品列表可以包括一个控制样品、一个或多个空白样品和其他时间过程样品，最多可达 15 个不同时间点。每个时间点最多可包括七个重复样品。若要使用重复样品，参阅第 23 页的“手动定义样品信息”了解详细说明。

仪器方法指定用于采集样品的仪器（更多有关创建和修改仪器方法的信息，参阅第 121 页的“使用仪器方法”）。处理方法指定应用程序如何处理数据以显示在 Data Review（数据查看）中或生成报告（更多有关处理方法的信息，参阅第 38 页的“创建处理方法”）。

创建实验后，可以保存实验或提交实验进行采集和处理。有关使用 Processing Only（仅处理）工作流程处理已采集实验的信息，参阅第 53 页的“处理已采集的数据”。

目录

- [定义样品信息](#)
- [配置实验](#)
- [提交和查看实验](#)
- [使用样品表列](#)

定义样品信息

MetQuest 应用程序提供两种插入组和样品信息的方法。可以利用应用程序手动插入所有组和样品信息，或导入包含信息的文件。

- [使用应用程序定义组信息](#)
- [手动定义样品信息](#)
- [导入包含组和样品信息的文件](#)

创建一个时间过程实验时，遵守下列要求：

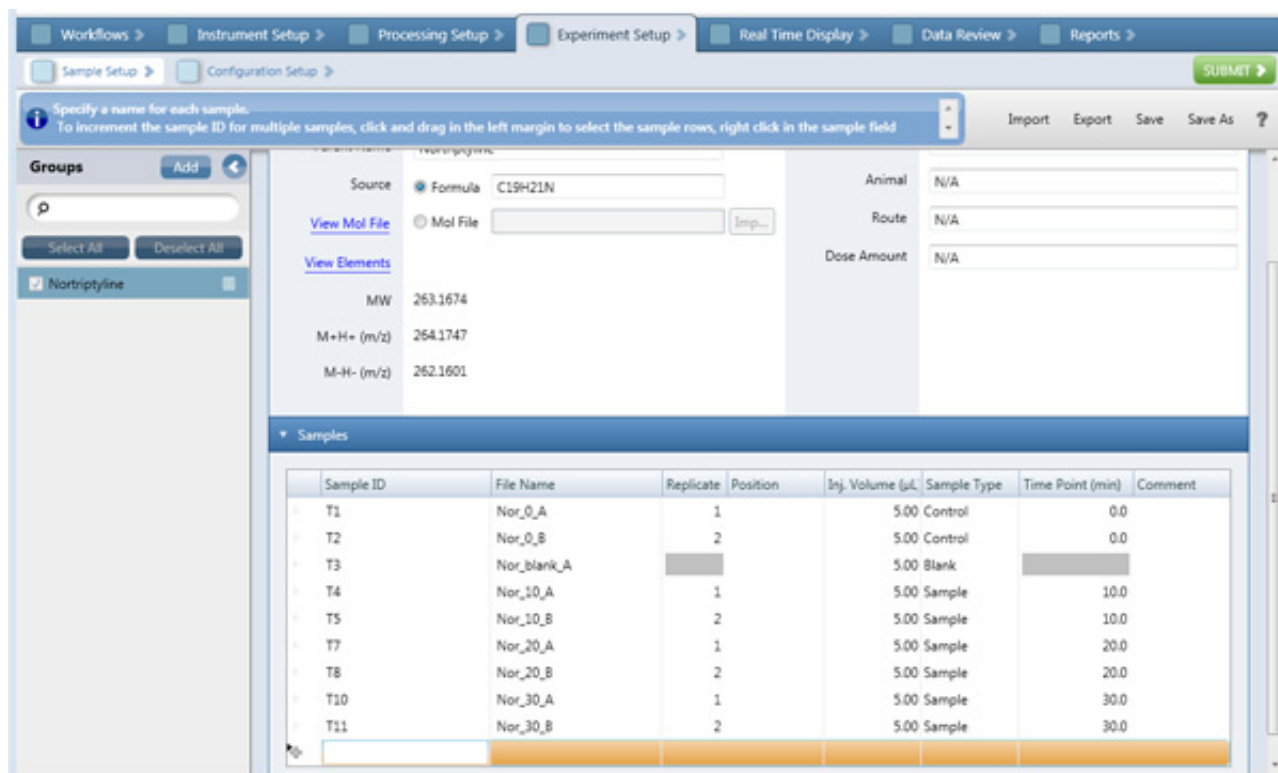
- 最多时间点数 = 15
- 最大重复数 = 7
- 实验中的所有组必须使用同一系列时间点。实验组无需使用所有相同时间点，但是出现的时间点值必须相同。一个组必须包含实验中剩余组所使用的所有时间点。具有不同时间点的组必须在单独实验中。
- 控制样品必须在 T0，它应该包括母体化合物。


❖ 若要定义一组样品的实验

1. 从 Workflows（工作流程）视图选择一个工作流程：
 - 若要为样品生成采集和处理实验，这在采集原始文件后可以立即开始处理，选择 **Acquisition and Processing**。
 - 若要采集数据以便以后处理，选择 **Acquisition Only**。
2. 单击 **New Experiment（新实验）** 启动一次新实验，或若要继续一个之前保存的实验，可从 Select an Experiment（选择实验）列表选择一个实验并单击 **Continue Experiment（继续实验）**。

当选择 Acquisition and Processing 时，一个样品实验出现。若要仔细查看这个实验，选择 **Example Experiment（示例实验）** 并单击 **Continue Experiment**。

Experiment Setup（实验设置）视图打开，显示 Sample Setup（样品设置）视图。



3. 若要在屏幕上为数据提供更多空间，点击右上角的  以隐藏 Thermo 图标。
4. 从 Groups（组）区域选择一个组为某个化合物定义时间过程实验。若要添加组，参阅第 16 页的“管理组”。
5. 手动定义组信息或导入包含组和样品信息的文件。

有关从模板创建一个包含样品信息的文件详情，参阅第 126 页的“利用组和样品信息创建文件”。

使用应用程序定义组信息

使用以下步骤定义组信息或在 Groups 区域修改。

- 管理组
- 定义组的实验信息
- 识别所用元素（对于 Acquisition and Processing 和 Processing Only 工作流程）

对于 Acquisition Only 工作流程，Group Parameters（组参数）区域在 Sample Setup 视图中呈灰色。可以稍后在 Processing Only 工作流程中定义组信息，以处理已采集数据。当保存或提交组进行采集时，MetQuest 应用程序锁定组信息。

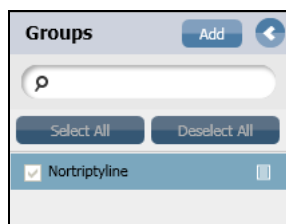
可以使用 Processing Only 工作流程向现有实验添加新组进行处理。若用户修改已处理组的信息，则必须重新处理这些组。

管理组

❖ 若要添加新组

1. 单击左侧 Groups 区域的 **Add**（添加）。

应用程序在 Groups 列表中显示一个新组。为组输入唯一名称（在此例中组的新名称是 Nortriptyline）。



如果命名一个组，而序列中另一组与其名称相同，MetQuest 应用程序显示一个警告信息。

2. 在 Groups 列表中输入一个新名称。
3. 若要为新组添加信息，在 Groups 区域列表中选择新组，然后在 Group Parameters 区域输入信息。

Parameter	Value
Processing Method	Targeted_PhaseIComplete.proc
Parent Name	Nortriptyline
Source	Formula: C19H21N
MW	263.1674
M+H+ (m/z)	264.1747
M-H- (m/z)	262.1601


有关添加组信息的更多信息，参阅第 16 页的“使用应用程序定义组信息”。

当保存或提交组进行采集时，MetQuest 应用程序锁定组信息。可以使用 Processing Only 工作流程向现有实验添加新组进行处理。若用户修改已处理组的信息，则必须重新处理这些组。

❖ **若要修改组信息**


1. 在 Groups 区域中选择组名。
2. 添加或修改 Group Parameters 区域中的信息。
3. 点击 **Save**（保存）保存新信息。

❖ **若要重新命名组**

1. 在 Groups 区域中选择组名。
2. 单击组名右侧的 ，然后单击 **Rename**（重命名）或双击组名。
3. 输入组的新名称，然后按下 RETURN（返回）。

可以在采集原始文件之后修改组名。

❖ **若要删除组**

1. 在 Groups 区域中选择组名。
2. 单击组名右侧的 ，然后单击 **Delete**（删除）。

可以在采集原始文件之后删除组。

❖ **若要找到组**

1. 在检索框中输入组名。
所有匹配自动出现在组列表中。
2. 若要再次查看所有组，在检索框中移除检索信息。

定义组的实验信息

Group Parameters 信息只适用于 Acquisition and Processing 和 Processing Only 工作流程。有关 Acquisition Only 工作流程，参阅第 23 页的“手动定义样品信息”。

❖ **若要定义一组样品的信息**

1. 在 Group Parameters 区域中选择一个定义应用程序如何处理数据结果的处理方法。

若要定义一个处理方法，参阅第 38 页的“创建处理方法”。

3 定义样品信息以便采集 定义样品信息

Group Parameters	
Processing Method	Targeted_PhaseIComplete.proc <input type="button" value="Import"/>
Parent Name	Nortriptyline
Source	<input checked="" type="radio"/> Formula <input type="text" value="C19H21N"/> <input type="button" value="Import"/>
	<input type="radio"/> Mol File <input type="button" value="Import"/>
View Mol File	
View Elements	
MW	263.1674
M+H+ (m/z)	264.1747
M-H- (m/z)	262.1601
Species	N/A
Matrix	N/A
Animal	N/A
Route	N/A
Dose Amount	N/A

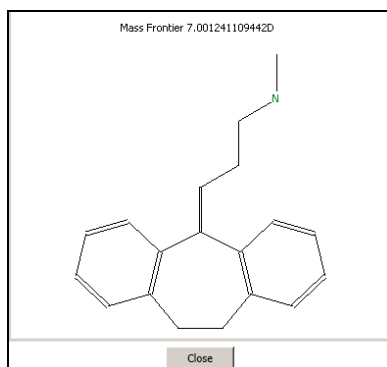
2. 在 Parent Name（母体药物名称）框内输入母体药物名称。

此字段为必填字段。应用程序采用母体药物名称进行出来，并在总结和详细报告中提供有关母体药物的信息。可以使用其他组中的相同母体药物名称，使用组信息模板更加简单。只使用字母和数字符号。

3. 利用下列方法之一添加母体药物分子式：

- 如果母体药物具有 .mol 文件，选择 **Mol File（Mol 文件）** 选项并单击 **Import（导入）**。选择文件，然后单击 **Open（打开）**。

应用程序显示来自文件的结构、质量数、分子式和其他值。若要查看 .mol 文件结构，单击 **View Mol File（查看 Mol 文件）** 以打开显示框。



- 如果没有 .mol 文件，选择 **Formula（分子式）** 选项并在 Formula 框内输入分子式。

应用程序计算并显示中性分子量和与分子式相关的其他值，例如质子化的分子式质荷比。

一旦添加分子式，MetQuest 应用程序在 Elements in Use（所用元素）对话框中添加分子式中的所有元素。有关详细信息，参阅第 20 页的“识别所用元素”。

- 4.（可选）根据需要填充以下值。这些值出现在详细和总结报告标题中：
 - a. 在 Species（种类）框内指定每个样品所用的种类（例如，老鼠、人类或狗）。
 - b. 在 Matrix（基质）框内指定每个样品的基质类型（例如，血液或尿液）。
 - c. 在 Animal#（动物编号）框内指定动物编号。
 - d. 在 Route（途径）框内输入 **in vitro（体外）** 或 **in vivo（体内）**。
 - e. 在 Dose Amount（剂量）框内输入剂量，包括单位（例如 μL ）。

表 2. Group Parameters

参数	描述
Processing Method (处理方法)	选择一个处理方法, 指定 MetQuest 应用程序如何处理采集数据。处理方法包括用于找到预计代谢物的参数。
Parent Name (母体药物名称)	输入母体药物的名称。
Source (来源)	为分子量计算选择一个来源。可在 Formula 框内输入母体药物分子式, 或选择一个 .mol 文件。
MW (分子量)	查看母体化合物的单同位素分子量。该值显示小数点后四位数字。应用程序在用户输入分子式的同时更新这个值。
M+H+ (m/z) (质子化, 质荷比)	如果实验以正离子模式运行, 查看应用程序用于处理数据的母体药物的质子化质荷比值。该值显示小数点后四位数字。应用程序确定相应实验和处理数据的极性。
M-H- (m/z) (去质子化, 质荷比)	如果实验以正离子模式运行, 查看应用程序用于处理数据的母体药物的去质子化质荷比值。该值显示小数点后四位数字。应用程序确定相应实验和处理数据的极性。
Species (种类)	查看每个样品的种类 (例如, 老鼠、人类或狗)。
Matrix (基质)	指定每个样品的基质类型 (例如, 血液或尿液)。
Animal# (动物编号)	指定动物识别号。
Route (途径)	输入 in vitro 或 in vivo 。
Dose Amount (剂量)	输入剂量, 包括单位 (例如 μL)。

识别所用元素

应用程序计算任何应用程序质谱数据的元素分子式，确认任何代谢物的识别。应用程序利用两个主要来源之一选择母体分子式的可能元素。

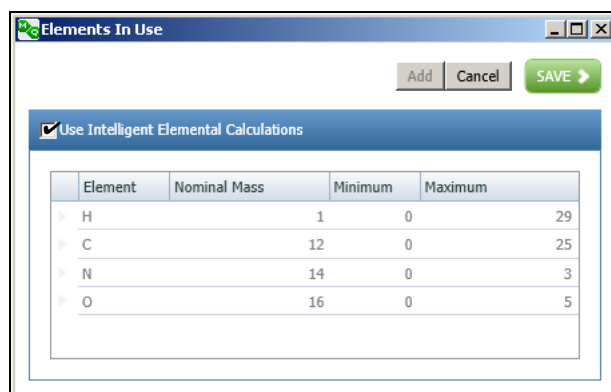
- 自动计算元素
- 利用 **Elements in Use** 表格指定元素

自动计算元素

MetQuest 应用程序通过使用处理方法中的母体药物和修饰列表，添加在母体中不存在但对处理至关重要的元素来自动计算元素。比较这些来源的信息，应用程序有效确认同位素分布。如果没有定义任何来源，应用程序无法提供任何结果。用户可以通过在 **Elements in Use** 表中添加元素进行处理。

❖ 若要自动计算元素

1. 单击 **Group Parameters** 区域的 **View Elements**（查看元素）以打开 **Elements in Use** 对话框。
2. 确保 **Use Intelligent Elemental Calculations**（使用智能元素计算）复选框选中。



在选择这个复选框后，应用程序使 **Elements in Use** 表格变灰。每次处理时，应用程序从最近的选择更新该表格，并使用当前结果，而不是现有自定义 **Elements in Use** 表格中的数据。

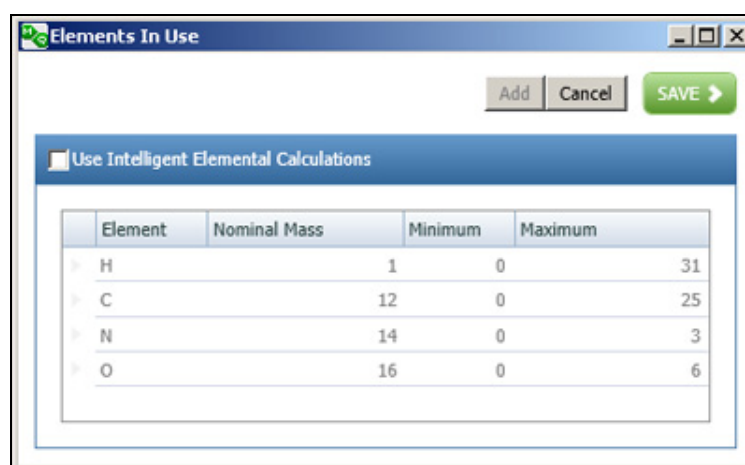
利用 Elements in Use 表格指定元素

还可以指定其他元素以及用于计算分子式的每个元素的最大和最小值。应用程序提供默认设置。

❖ 若要识别用于处理的元素

1. 若要查看 Elements in Use 对话框并修改用于分析的元素列表，单击 Group Parameters 区域的 **View Elements**。
2. 清除 **Use Intelligent Elemental Calculations** 复选框以修改 Elements in Use 表格。

可以从 Elements in Use 表格中添加或删除元素。一旦定义母体药物分子式，MetQuest 应用程序在 Elements in Use 对话框中添加分子式中的所有元素。



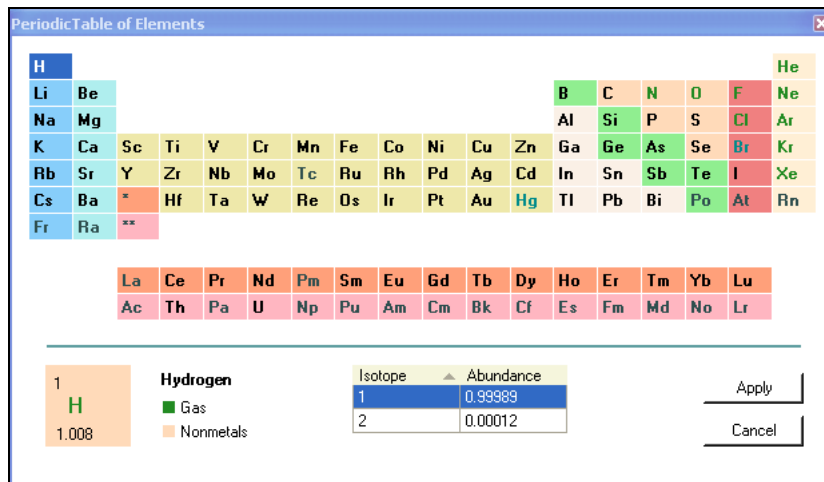
Elements in Use 表格使用下列有效值原则：

- 如果选择 C，默认 Minimum（最小值）= 0，默认 Maximum（最大值）= 100。
- 如果选择 H，默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 200。
- 如果选择 O，默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 15。
- 如果选择 N，默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 10。
- 如果添加其他元素，默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 3。

除了母体药物分子式中的元素，还可以添加其他元素。确保添加元素的最大值超过最小值。例如，如果预计硫酸化修饰，单击 S 添加硫元素。

如果修改母体药物分子式，MetQuest 应用程序会修改 Elements in Use 表格以匹配新分子式。

3. 若要从母体分子式添加元素以确定检索结果，单击 **Add** 显示周期表。选择元素后单击 **Apply**（应用）将元素添加到 Elements in Use 表格并关闭周期表。



4. 如果所选元素显示多个同位素，选择丰度最大的那个可获得更好的结果。
5. 若要移除元素分子式用到的元素，在 Elements in Use 表格中选择最左侧元素行，按下 **DELETE**。
6. 单击 **Apply** 保存所用元素选项，返回 Sample Setup 视图或单击 **Cancel**（取消）返回之前检索选项，不保存修改。

表 3. Elements in Use 对话框参数

参数	描述
Element（元素）	元素的化学缩写。 有效值可以是周期表中的任何符号。 默认： <ul style="list-style-type: none"> • C: 默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 100 • H: 默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 200 • O: 默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 15 • N: 默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 10 • 如果添加其他元素，默认 Minimum = 0，默认 Maximum = 3
Nominal Mass（名义质量）	定义代表性元素同位素的原子质量。
Minimum（最小值）	设置可使用的最小元素数目。 有效值：0 至 10 000 默认值：0
Maximum（最大值）	设置可使用的最大元素数目。 有效值：0 至 10 000

手动定义样品信息

使用下列程序定义样品信息。若要导入包括组和样品信息的文件，参阅第 26 页的“导入包含组和样品信息的文件”。

由于单次测量几乎无法为决策提供准确信息，MetQuest 应用程序支持多次进样（重复样品）和平均结果。可以创建同一样品的多次进样，或重复样品制备，每个样品进样一次或多次。使用重复样品使平均值更可靠。如果使用多次进样并得到每次进样的结果，可以排除由于样品制备误差、自动进样器误差、或仪器分析问题可能导致的结果，避免失去整个组的结果。MetQuest 应用程序中的所有工作流程支持重复进样。

可以在采集过程中注入空白样，以在高浓度和低浓度样品之间清洗系统，也可以划分在某种母体组及另一中母体组。无需为空白样提供时间点或重复数字。若用户希望将已有记录转换至空白样，应用程序删除时间和重复值。

若要向下复制信息（Injection Volume（进样体积），Sample Type（样品类型）），参阅第 34 页的“使用 Copy Down 在连续行中重复某单元格内容”。若要递增复制信息（Sample ID（样品识别号），File Name（文件名），Vial Position（样品瓶位置）），参阅第 34 页的“使用 Fill Down 在连续行中递增某单元格内容”。

❖ 若要输入样品信息

1. 若要在表格中输入样品信息，在启动样品采集之前至少输入下列信息。
 - a. 输入 Sample ID。只使用字母和数字符号。此值用于采集，但是不显示在最终报告中。
 - b. 在 File Name 列中输入唯一文件名识别样品原始文件。文件名格式为 *RawfileName.raw*。
 - c. 在 Position（位置）列中，右击 **Fill Down（向下填充）** 以自动提供从首个位置开始的托盘位置。

也可以输入自动进样器的样品瓶或板位置号。如果该值的格式不适用于自动进样器，MetQuest 应用程序在单击 Submit（提交）时显示错误信息。

对于 Accela、Agilent 1200 和 Accela PDA 自动进样器，托盘类型显示在 Acquisition Parameters（采集参数）区域的 Tray Name（托盘名称）域中。对于支持一种以上可配置托盘类型的自动进样器（Open Accela 和 CTC Thermo PAL 自动进样器和组合的 UltiMate 3000（DCMS^{Link}），Tray Name 域显示为 As Configured（如配置）。

有关自动进样器样品瓶或板位置格式和多个托盘信息，参阅自动进样器文档。

- d. 在 Inj. Volume（进样体积）列中指定样品的进样体积（单位 μL ）。该值与自动进样器限值有关。
- e. 在 Time Point（时间点）列中，以分钟为单位输入时间点。为任何实验或组输入最多 15 个时间点。

应用程序检查所有组是否具有相同的时间点以创建一个复杂的 .csv 文件。实验中的所有组必须使用同一系列时间点，单位是分钟。在 MetQuest 应用程序中无法将时间点分配给空白样品。若用户希望将已有记录转换至空白样，删除时间点值。

3 定义样品信息以便采集

定义样品信息

当单击 **Submit** 时，应用程序检查组数目和组内的值。如果用户组有一个时间点未列在定义组中，应用程序提示修复这个时间点。可以在继续样品提交之前移除组，修改时间点。

如果打开实验具有不正确的时间点，必须在重新处理或提交样品之前修复这些时间点。

f. 为每个样品输入进样体积。

使用自动进样器时，可以在 **Instrument Setup**（仪器设置）视图的 **Autosampler**（自动进样器）对话框中设置默认进样体积。可以使用的最小和最大进样体积取决于自动进样器的配置。可用范围取决于进样模式，并且可能比状态栏上显示的范围小。更多信息参阅自动进样器手册。

2. 当有重复样品时，为相同时间点的样品指定不同重复号。

可以任何顺序输入重复时间点。

每个重复系列（每行）可以在时间 T0 处具有自己的控制样品。首个重复系列必须以重复数 1 开始。即使用户删除一个重复系列，重复数必须连续。不要为空白样品提供重复数。若用户希望将已有记录转换至空白样，删除重复值。

3.（可选）根据需要指定其他参数值，以处理采集的原始文件。有关其他参数的特定信息，参阅表 4。

如果计划立即处理采集数据，必须在提交信息进行采集之前，在 **Sample Setup** 视图的样品表中定义时间点、样品编号和样品类型。

- 指定样品类型。自动处理需要这个值。根据样品类型选择 **Control**（控制样品）、**Blank**（空白样品）或 **Sample**（样品）。可在表格中以任何顺序输入样品。如果实验有控制样品，控制样品必须在 T0，而且必须包括母体药物。但是控制样品不是必需的。
- 在时间系列中指定样品时间点，单位分钟。自动处理需要这个值。

表 4. 样品参数

参数	描述
Sample ID (样品标识号)	指定每个样品的识别号。(该值不会显示在报告中。) 最大长度: 255 个数字和字母符号。
File Name (文件名)	为最初原始文件指定一个唯一的文件名。MetQuest 应用程序将原始文件另存为 <i>RawfileName.raw</i> 。采集需要这个值。每个样品的文件名必须是唯一的。 最大长度: 150 个字符。
Replicate (重复)	为同一组内特定时间点的重复样品指定唯一编号。对于单样品, 设置该值为 1。如果具有两个相同时间点, 应用程序会发出通知, 然后可以指定唯一值。不要为空白样品提供重复数。 当导入 SLD 文件时, 没有重复信息。MetQuest 应用程序以默认值 (1) 填充 Replicate 列。导入 SLD 文件后定义重复信息。 有效值: 1 至 7 默认值: 1
Position (位置)	指定为系统配置的自动进样器的样品瓶或板位置号。右击该域, 然后选择 Fill Down 以使软件填充位置号, 或输入号码。若对于自动进样器, 该值的格式不正确, 则当用户单击 Submit 时 MetQuest 应用程序显示错误信息。有关自动进样器样品瓶或板位置格式和多个托盘信息, 参阅自动进样器文档。采集需要这个值。 对于 Accela、Agilent 1200 和 Accela PDA 自动进样器, 托盘类型显示在 Acquisition Parameters 区域的 Tray Name 域中。对于支持一种以上可配置托盘类型的自动进样器 (Open Accela 和 CTC Thermo PAL 自动进样器和 UltiMate 3000 (DCMS ^{Link}), Tray Name 域显示为 As Configured。
Inj. Volume (µL) (进样体积, µL)	采集需要这个值。 如果正在使用自动进样器, 可以在 Instrument Setup 窗口的 Autosampler 对话框中设置默认进样体积。可以使用的最小和最大进样体积取决于自动进样器的配置。可用范围取决于进样模式, 并且可能比状态栏上显示的范围小。更多信息参阅自动进样器手册。
Sample Type (样品类型)	根据需要进行选择 Control、Blank 或 Sample。选择 Control 或 Sample 进行自动处理。应用程序利用控制文件进行背景比较, 扣除控制样品中出现的峰。
Time Point (min) (时间点, min)	在时间系列中指定样品时间点, 单位分钟。自动处理需要这个值。不要为空白样品指定时间点值。 有效值: 0 至 2880 分钟 (48 小时)。 实验中的所有组必须使用同一时间点值, 单位是分钟。MetQuest 应用程序也将时间点值限制为 15。
Comment (注释)	输入这些样品的可选注释。该信息不用于处理且不出现在总结或详细报告中。但出现在 CSV 报告中。 最大长度: 255 个字符。

导入包含组和样品信息的文件

如果导入包括样品信息的文件，MetQuest 应用程序移除所有当前显示的组和样品信息。可以通过识别标准模板中的重复数，导入包含重复样品的文件。

❖ 若要导入文件进行采集

1. 为实验创建并保存 .csv 文件。

有关创建提供组和样品信息的文件，参阅第 126 页的“利用组和样品信息创建文件”。

2. 选择实验和工作流程类型。
3. 在 Sample Setup 视图中单击 **Import**，在浏览框中选择 .csv 文件然后单击 **Open**。

应用程序打开默认位置，除非该位置已被修改。假如位置被修改，MetQuest 应用程序打开最后定义的位置。文件提供组和样品信息。如果组信息不完整，参阅第 16 页的“使用应用程序定义组信息”了解详情。

4. 查看组和样品信息，确保其准确性。对于 Acquisition and Processing 工作流程，为每组添加一个处理方法。当包括空白样品时，删除时间点和重复数值。
5. 单击 **Configuration Setup**（配置设置）选项卡并定义仪器设置。有关详细信息，参阅第 27 页的“配置实验”。
6. 单击 **Submit** 采集样品。

当提交或保存实验时，MetQuest 应用程序确认文件名、位置和进样体积，以确保采集正确运行。如果样品瓶或板位置，或进样体积不正确，MetQuest 应用程序在信息栏中显示警告信息，信息栏专门发布用于校正的进样体积有效范围或有效位置。无法保存或提交实验进行采集，除非已经校正了所有确认错误。

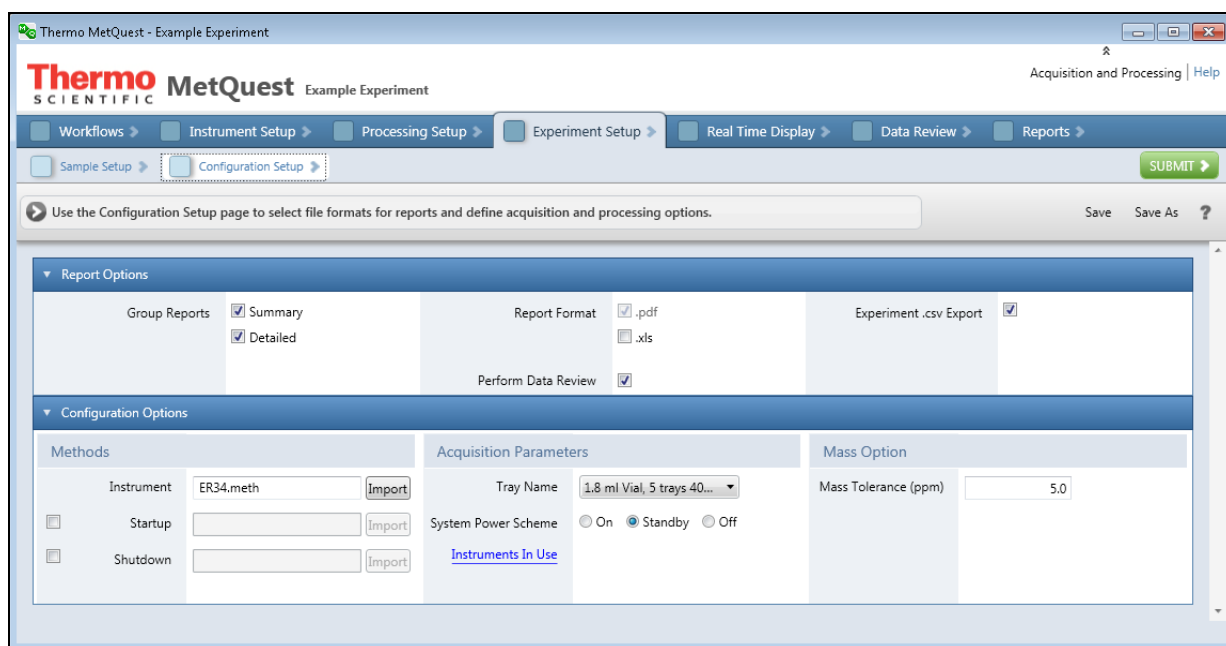
提交实验后，若要查看采集状态，单击 **Real Time Display**（实时显示）选项卡。有关详细信息，参阅第 63 页的“查看采集状态”。

配置实验

使用 Experiment Setup 视图定义整个实验的选项。可以设置报告选项并配置采集值。

- 设置报告选项
- 指定配置选项
- ❖ 若要指定实验的配置选项

若要添加或修改仪器和处理信息，单击 **Configuration Setup** 选项卡查看 Report Options（报告选项）和 Configuration Options（配置选项）区域。



设置报告选项

使用 Report Options 区域选择报告模板显示实验的处理结果。应用程序总会提供 PDF 格式的总结报告和详细报告。

可以选择应用程序是否在处理之后自动生成报告，或在 Data Review 视图中检查处理结果之后生成报告。如果选择不生成报告，包括 .csv 报告，应用程序在处理实验之后打开 Data Review 视图，这样可以查看和调整结果，并生成报告。Data Review 或报告中不包括空白样品。

❖ 若要指定报告类型

1. 从 Experiment Setup 视图单击 **Configuration Setup** 选项卡。
2. 若要在创建报告之前查看实验结果，选择 **Perform Data Review**（执行数据查看）复选框。默认选项选中。

在该情况下，处理完成后不会生成报告，系统提醒切换到 Data Review。若要从 Data Review 窗格生成报告，在 Data Review 中单击 **Generate Reports**（生成报告）按钮，选择报告选项并生成报告。

若要使应用程序自动生成报告，清除 **Perform Data Review** 复选框。

3. 选择要生成的组报告：**Summary**（总结）和 / 或 **Detail**（详细）报告。在组报告的文件夹中，为每组实验生成这些报告（例如：
C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example
Experiment\Groups\Nortriptyline\Reports\）。
4. 在 Report Options 区域内选择组报告格式。

Report Options		
Group Reports	<input type="checkbox"/> Summary <input type="checkbox"/> Detailed	Report Format
		<input checked="" type="checkbox"/> .pdf <input type="checkbox"/> .xls
		Experiment .csv Export <input checked="" type="checkbox"/>
		Perform Data Review <input checked="" type="checkbox"/>

- 若要创建 Microsoft Excel™ 电子表格（.xls）报告，选择 **.xls** 复选框。使用这个文件类型创建一个记录，用于导入 LIMS。默认：不选中。
- 当应用程序生成报告时，应用程序总是创建一个便携式文档格式（.pdf）报告。
- 若要导出逗号分隔值（.csv）文件，选择 **Experiment .csv Export**（以 **.csv 导出实验**）复选框。这个报告包括整个实验的处理结果。有关导出 .csv 文件和文件内容的信息，参阅第 113 页的“处理实验 CSV 文件”。

若要打印报告，参阅第 116 页的“打印报告”。当应用程序识别大量代谢物时，文件可以很大。

指定配置选项

使用该视图定义处理实验的一般采集处理值。有关采集参数的说明，参阅 31 页的表 5。

- 指定仪器方法
- 定义采集参数
- 指定质量数容许偏差值

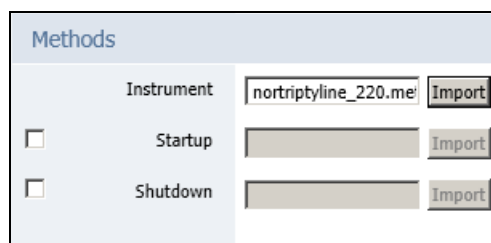
指定仪器方法

使用 Methods（方法）区域指定采集的仪器方法。只能选择已经定义和保存的仪器方法。使用 Methods 区域指定采集的启动和关闭仪器方法。

❖ 若要指定仪器方法

1. 若要在 Methods 视图选择定义仪器参数的仪器方法，单击 **Import**。

若要定义一个仪器方法，参阅第 121 页的“创建仪器方法”。



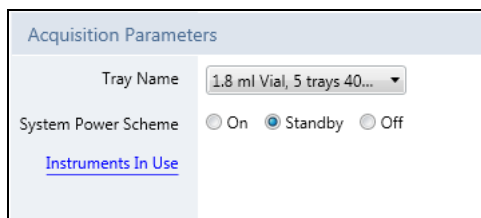
Methods		
	Instrument	nortriptyline_220.me Import
<input type="checkbox"/>	Startup	Import
<input type="checkbox"/>	Shutdown	Import

2. 若要使用启动方法，选择 **Startup**（启动）复选框并单击 **Import**。
在浏览框中选择一个方法文件，单击 **Open**。
3. 若要使用关闭方法，选择 **Shutdown**（关闭）复选框并单击 **Import**。
在浏览框中选择一个方法文件，单击 **Open**。

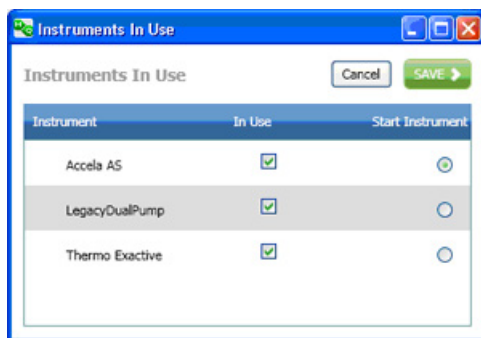
定义采集参数

❖ 若要定义采集参数

1. 若要定义采集使用的仪器，单击 **Instruments in Use**（所用仪器）打开对话框，显示目前配置使用 MetQuest 应用程序的仪器。



2. 选择用于采集的每个仪器的复选框。
3. 选择 **Start Instrument**（启动仪器）选项选择一个启动仪器。单击 **Save** 返回 Acquisition Parameters 区域。



4. 在 Acquisition Parameters 区域，查看与 Instrument Configuration（仪器配置）视图中配置的自动进样器对应的托盘。

必须有在 MetQuest 代谢物稳定性筛选软件内配置的仪器，以便应用程序显示托盘名。如果正在使用多个托盘，根据自动进样器文档中的指示修改样品瓶或盘的位置。

对于 Accela、Agilent 1200 和 Accela PDA 自动进样器，托盘类型显示在 Acquisition Parameters 区域的 Tray Name 域中。对于支持一种以上可配置托盘类型的自动进样器（Open Accela 和 CTC Thermo PAL 自动进样器和组合的 UltiMate 3000（DCMS^{Link}），Tray Name 域显示为 As Configured。

5. 若要在处理完成后定义仪器状态，为系统电源系统选择下列选项之一：
 - 若要保持仪器处于激活状态，可立即载入更多样品，选择 **On**（开机）选项。
 - 若要使泵处于待机状态，停止溶剂液流，选择 **Standby**（待机）选项。
 - 若要在运行结束后关闭仪器，节约电能，选择 **Off**（关机）选项。该选项极少使用，因为仪器放空和恢复真空需要很长时间。

表 5. 采集参数

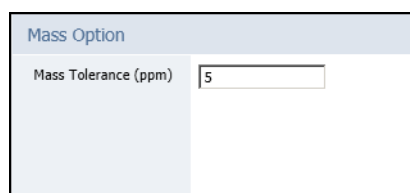
参数	定义
Tray Name (托盘名称)	<p>在样品的 Tray Name 列表中查看自动进样器托盘。</p> <p>必须有在 MetQuest 应用程序内配置的仪器，以便应用程序显示托盘名。如果正在使用多个托盘，根据自动进样器文档中的指示修改样品瓶或盘的位置。</p> <p>对于 Accela、Agilent 1200 和 Accela PDA 自动进样器，托盘类型显示在 Acquisition Parameters 区域的 Tray Name 域中。对于支持一种以上可配置托盘类型的自动进样器（Open Accela 和 CTC Thermo PAL 自动进样器和 UltiMate 3000 (DCMS^{Link})，Tray Name 域显示为 As Configured。</p>
System Power Scheme (系统电源管理)	<p>定义处理完成之后的仪器状态。从以下选项选择其一：</p> <ul style="list-style-type: none"> • 若要保持仪器处于激活状态，可立即载入更多样品，选择 On 选项。 • 若要使泵处于待机状态，停止溶剂液流，选择 Standby 选项。 • 若要在运行结束后关闭仪器，节约电能，选择 Off 选项。该选项极少使用，因为仪器放空和恢复真空需要很长时间。

指定质量数容许偏差值

利用 Mass Option（质量数选项）区域指定质量数容许偏差值。若要优化这些算法，仅当计算分子式在指定容许偏差内与观察质量数相匹配时，应用程序返回元素组成检索结果。指定在组分检测过程中使用的质量数容许偏差（提取宽度）。

❖ 若要指定质量数容许偏差

在 Mass Tolerance (ppm)（质量数容许偏差，ppm）框中输入值以检测组分。该值用于创建色谱图。



The image shows a software interface window titled "Mass Option". Inside the window, there is a label "Mass Tolerance (ppm)" followed by a text input field containing the number "5".

有效值：1 至 500 ppm 默认值：5 ppm

提交和查看实验

如果已经修改了 Processing Setup（处理设置）视图，必须在采集数据之前保存方法修改。

重要信息 当修改处理方法后在 Sample Setup 视图中定义信息时，必须导入保存的方法，即使它替换了之前名称相同的方法。

在提交实验进行采集和处理后，就无法改变仪器配置参数，直到 MetQuest 应用程序已经完成处理。采集和处理完成后，可以修改仪器设置。

若要保存实验，但是不提交，单击 **Save** 或 **Save As（另存为）**。如果单击 Save As，应用程序复制所有需要文件（包括方法文件）到一个具有新实验名称的文件夹。

❖ 若要提交实验

1. 单击 **Submit** 处理样品。

当单击 Submit 时，MetQuest 应用程序将采集过程的原始文件保存到安装 MetQuest 软件的硬盘上的

\Thermo\MetQuest\Experiments*experiment_name*\group_name\Acquired 文件夹下。

如果已经选择了包括数据处理的实验，当采集了样品文件后，MetQuest 应用程序开始处理。应用程序根据样品设置表格将原始文件命名为 *RawfileName.raw*。

当提交或保存实验时，应用程序确认文件名、位置和进样体积，这样采集序列正确运行。如果样品瓶或板位置或进样体积不正确，MetQuest 信息栏显示指定有效值范围的信息。

当确认序列后，应用程序也检查这些要求：

- 最多时间点数为 15。
- 实验中的所有组必须使用同一系列时间点。应用程序使用具有最多时间点个数的组定义实验内的指定时间点。如果两个文件都具有最多时间点数，应用程序在组列表中选择第一组，即使用这一组的时间点。若某组没有时间，应用程序将时间点视为丢失，并将所有组分支标记为无值（NV）。
- 控制均在 T0。

MetQuest 应用程序通过 Import Validation（导入确认）对话框提供导入和提交错误。

如果应用程序正在采集数据，它必须在完成第一个实验后才能采集新实验数据。实验处理在采集开始后立刻开始。根据第一个实验的的样品数，采集可能被延迟。

在提交一个采集和处理实验后，如果得到一个“Processing Failed（处理失败）”信息，应用程序不创建有效峰列表。这可能是由于文件中没有有效组分，或者在 Metabolite Filtering Options（代谢物过滤选项）区域中指定的质量数容许偏差内无法找到母体药物。

在处理时，可以打开不同的处理方法并修改它，不会影响当前的处理序列。

- 若要查看实时处理，单击 **Real Time Display** 选项卡。

Real Time Display 视图显示当前采集和处理详情。如果选择 Data Review 选项，应用程序在完成采集和处理后转至 Data Review 视图。有关使用 Data Review 修改处理数据的信息，参阅第 74 页的“利用 Data Review 查看和修改测试结果”。若要查看报告，参阅第 104 页的“查看实验报告”。

使用样品表列

使用下列说明修改样品视图中的列、行和数据。可以在样品表内进行下列修改：

- 添加或删除行
- 向下复制
- 向下填充
- 复制和粘贴行

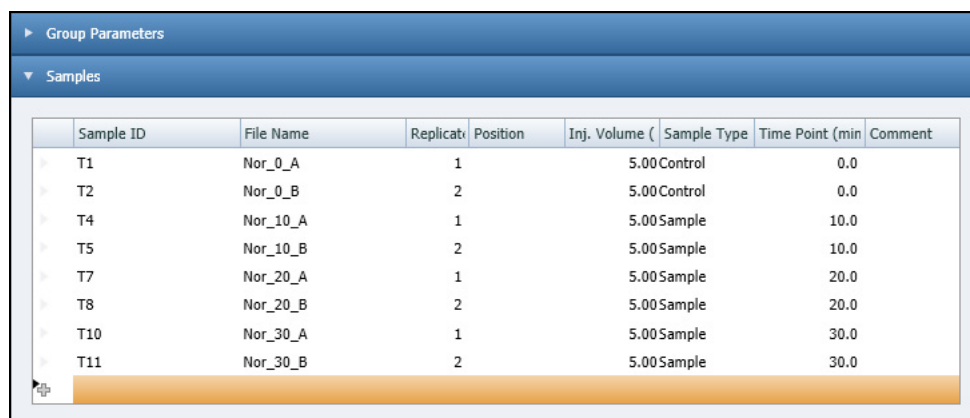
❖ 若要在单元格之间切换

1. 若要在单元格之间切换，按下 TAB。
2. 若要返回前一单元格，按下 SHIFT+TAB。

❖ 若要添加新行

1. 若要在包含 Add Row（添加行）图标（）的表格底部添加行，在底部空行中输入样品信息并按下 TAB。

应用程序将新行添加至底部。



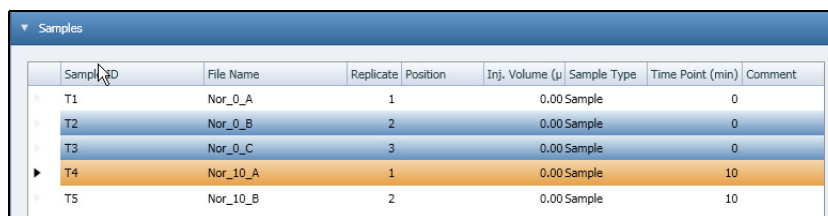
Sample ID	File Name	Replicate	Position	Inj. Volume (µl)	Sample Type	Time Point (min)	Comment
T1	Nor_0_A	1		5.00	Control	0.0	
T2	Nor_0_B	2		5.00	Control	0.0	
T4	Nor_10_A	1		5.00	Sample	10.0	
T5	Nor_10_B	2		5.00	Sample	10.0	
T7	Nor_20_A	1		5.00	Sample	20.0	
T8	Nor_20_B	2		5.00	Sample	20.0	
T10	Nor_30_A	1		5.00	Sample	30.0	
T11	Nor_30_B	2		5.00	Sample	30.0	

2. 若要在表格中部插入复制行，右击需要粘贴位置上方的行，从快捷菜单选择 **Paste Below**（下方粘贴）在所选位置粘贴行信息。也可以选择 **Paste Above**（上方粘贴）在所选行上方插入一行。

❖ 若要复制行内容

1. 在左侧空白处选择行指针，输入内容并选择一行。

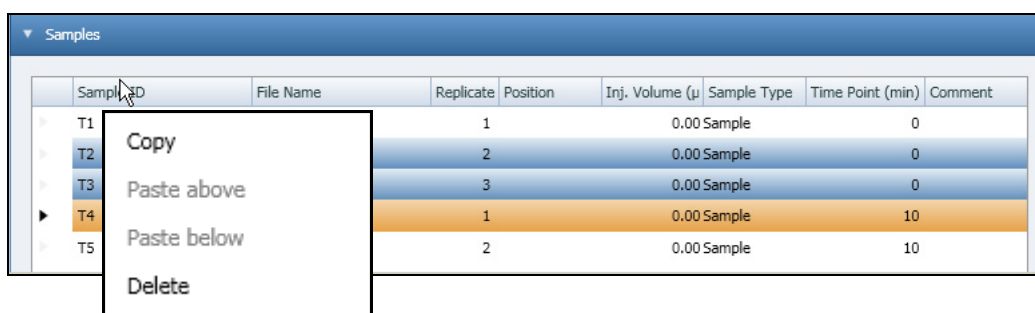
对于多行，在左侧空白处单击并向下拖动光标选择更多行。



Sample ID	File Name	Replicate	Position	Inj. Volume (µl)	Sample Type	Time Point (min)	Comment
T1	Nor_0_A	1		0.00	Sample	0	
T2	Nor_0_B	2		0.00	Sample	0	
T3	Nor_0_C	3		0.00	Sample	0	
T4	Nor_10_A	1		0.00	Sample	10	
T5	Nor_10_B	2		0.00	Sample	10	

2. 右击所选行的左列，从快捷菜单选择 **Copy**（复制）。

应用程序将行内容复制至剪贴板。



Sample ID	File Name	Replicate	Position	Inj. Volume (µl)	Sample Type	Time Point (min)	Comment
T1		1		0.00	Sample	0	
T2		2		0.00	Sample	0	
T3		3		0.00	Sample	0	
T4		1		0.00	Sample	10	
T5		2		0.00	Sample	10	

- Copy
- Paste above
- Paste below
- Delete

❖ 使用 Copy Down 在连续行中重复某单元格内容

1. 在单元格中输入内容。

可以复制 Injection Volume 和 Sample Type 域中的值。

2. 若要选择多行以复制信息，选择第一列左侧行指针（▶）并从左列向下拖曳以选择要粘贴的行。
3. 右击准备复制的起始行单元格，从快捷菜单选择 **Copy Down**（向下复制）。

应用程序将行内容复制至连续行。

❖ 使用 Fill Down 在连续行中递增某单元格内容

1. 在单元格中输入内容。

可以递增 Sample ID、File Name 和 Position 域内的值。

2. 若要选择多行以递增某单元格内容，选择行指针（▶）并从左列拖动光标选择获得递增值的多行。
3. 右击准备复制的行单元格，从快捷菜单选择 **Fill Down**（向下填充）。

应用程序将在连续行中递增行内容。

❖ **若要完整移除行**

1. 通过选择第一列左侧行指针 (▶) 选择要移除的一行或多行。
2. 按下 DELETE 键或右击其中某个选中行的指针 (▶)，从快捷菜单中选择 **Delete**。
3. 单击 **Yes (是)** 删除行。

❖ **若要移除域内容**

1. 选择域内容。
2. 按下 CTRL+X 或右击然后从快捷菜单选择 **Cut (剪切)** 移除内容并将内容复制到剪贴板。

可以使用 CTRL+C 键或 Copy 命令，将内容复制到剪贴板，使用 CTRL+V 键或 Paste (粘贴) 菜单从剪贴板中复制内容。

3 定义样品信息以便采集 使用样品表列

使用处理方法

处理方法确定 MetQuest 应用程序如何处理数据。一个方法（.proc 文件扩展名）定义一个样品的数据处理和报告参数。当处理样品时，应用程序提供一系列结果文件和电子报告。利用 Report（报告）视图查看报告文件（.pdf 和 .xls）。

若要在采集后直接处理数据，在提交样品进行采集之前在 Sample Setup（样品设置）视图中选择一个处理方法，并指定样品值（参阅第 14 页的“定义样品信息”了解更多设置样品信息）。

若要处理已采集的数据，参阅第 54 页的“利用 MetQuest 应用程序处理采集数据”。

Processing Setup（处理设置）视图显示每个数据处理步骤要用的下列选项和参数，这些步骤是整个工作流程配置的一部分。

- 比较样品组分和控制组分的参数
- 预期修饰列表
- 内标数据条目
- 元素组成限值
- 在峰面积计算中包括加合物峰的选项
- 高级谱图拟合设置
- 峰容许标准

可以创建新方法，修改已有方法，并保存方法文件。

采用这些主要步骤创建或修改方法。在处理样品之前必须创建至少一个方法。

目录

- [创建处理方法](#)
- [修改处理方法](#)

创建处理方法

若要创建处理方法，完成这些步骤：

- [设置代谢物检索参数](#)
- [指定内标和元素组成设置](#)

设置代谢物检索参数

使用 Metabolite Options （代谢物选项）视图设置代谢物检索参数。MetQuest 应用程序使用每个组内的控制文件进行背景比较。



应用程序提供待检索的代谢物列表。找到的代谢物被包含在检索结果中。

- [定义控制比较值](#)
- [定义保留时间范围](#)
- [指定预计代谢物](#)

保存处理方法以后，可以保存并重新打开包含检索参数的方法，在 Sample Setup 视图中为实验的每组指定处理方法。

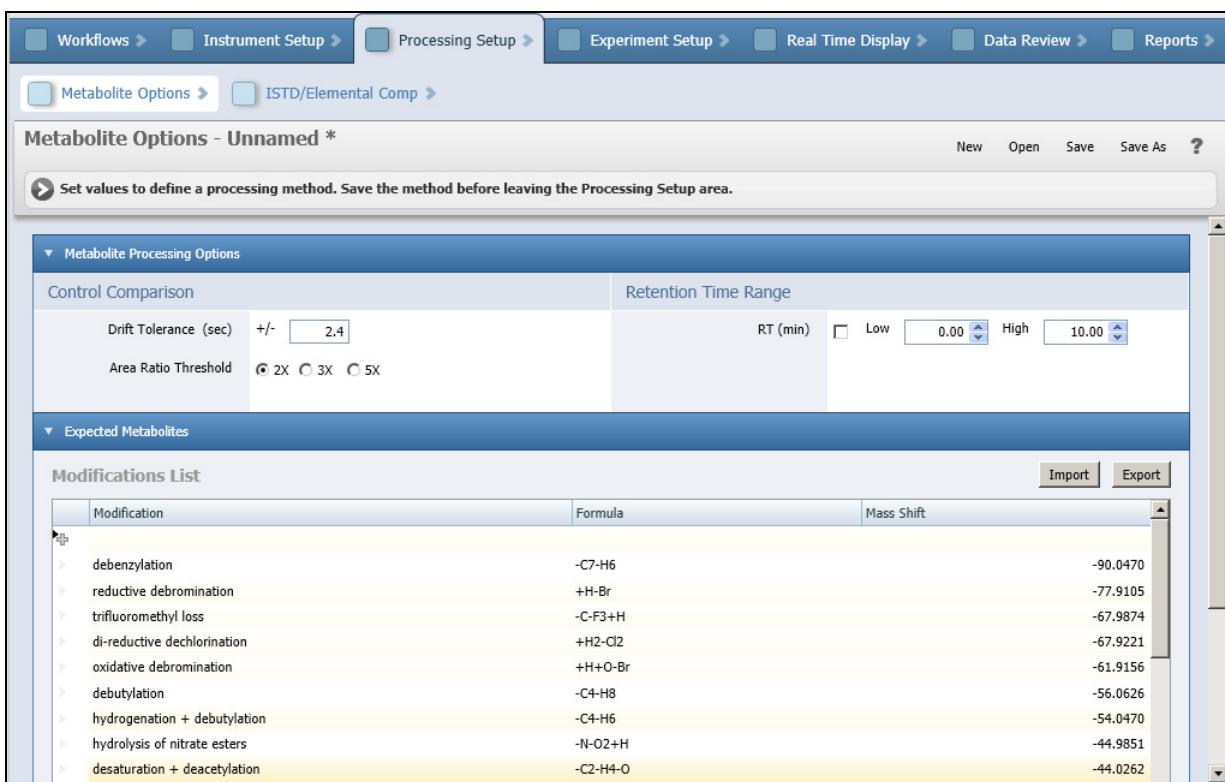
定义控制比较值

❖ 若要设置检索代谢物的处理方法

1. 单击  启动应用程序或选择 **Start (开始) > Programs (程序) > Thermo > MetQuest**。
2. 若要在页面上为数据提供更多空间，点击右上角的  以隐藏 Thermo 图标。
3. 选择一个工作流程类型。

若要修改或创建处理方法，选择 **Acquisition and Processing (采集和处理)** 工作流程。

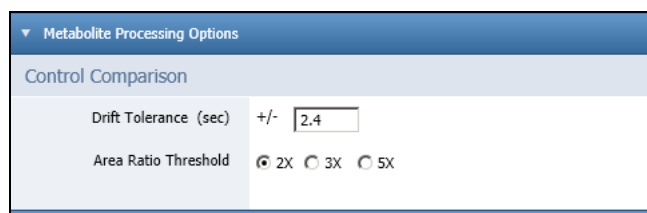
4. 单击 **Processing Setup** 选项卡打开 Metabolite Options 视图。



Modification	Formula	Mass Shift
debenzylolation	-C7-H6	-90.0470
reductive debromination	+H-Br	-77.9105
trifluoromethyl loss	-C-F3+H	-67.9874
di-reductive dechlorination	+H2-Cl2	-67.9221
oxidative debromination	+H+O-Br	-61.9156
debutylation	-C4-H8	-56.0626
hydrogenation + debutylation	-C4+H6	-54.0470
hydrolysis of nitrate esters	-N-O2+H	-44.9851
desaturation + deacetylation	-C2-H4-O	-44.0262

5. 在 **Control Subtraction (控制扣除)** 区域中，指定 **Drift Tolerance (sec) +/-** (漂移容许偏差 (sec) +/-) (以秒为单位的保留时间窗口大小)。

更改漂移容许偏差值以按需要调整组分组。

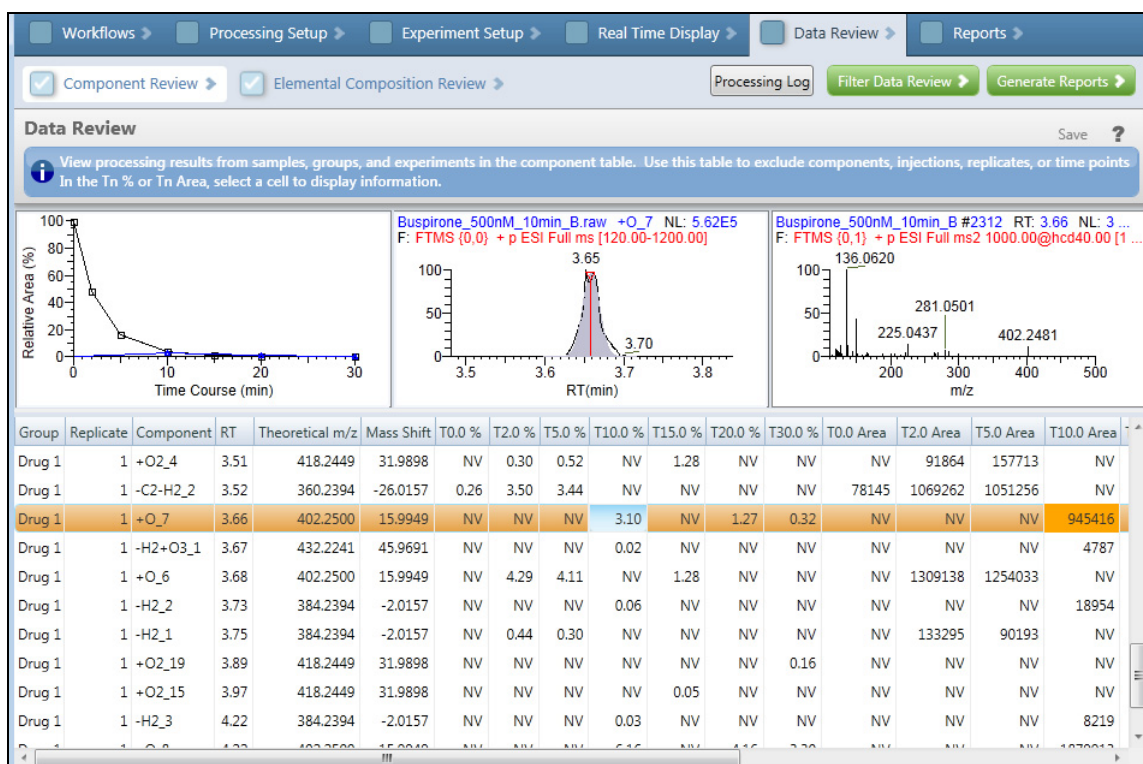


4 使用处理方法

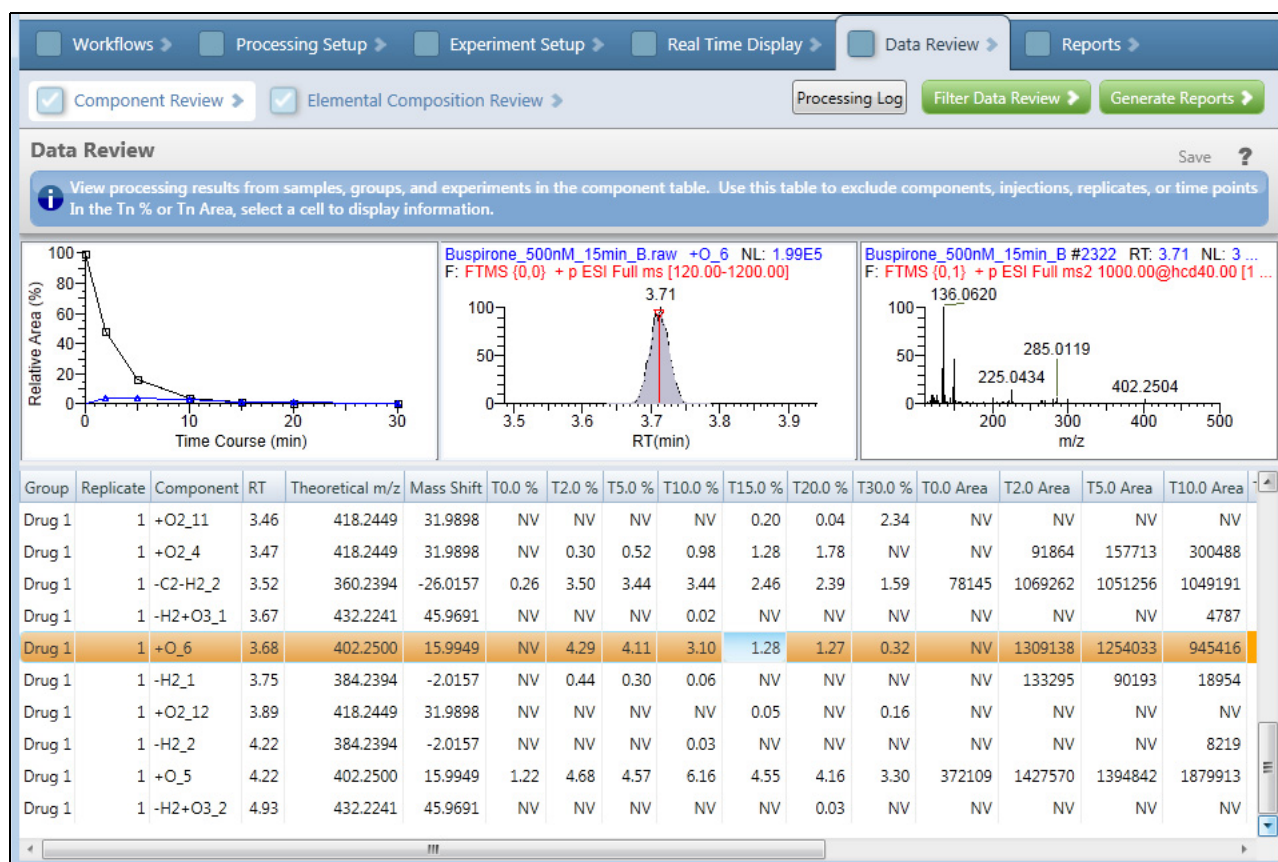
创建处理方法

应用程序利用漂移容许偏差窗口寻找样品间保留时间发生略微漂移的峰。若选择的漂移容许偏差窗口过大或过小，应用程序可能会将本不该合并的组分合并，把本该合并的组分分离。应用程序在指定保留时间前后添加这个值，以扩展检索区域。例如，如果峰位于 3.00 分钟，选择补偿值 30 秒，那么应用程序检索范围是 2.5 到 3.5 分钟。不包括这个保留时间范围以外的结果。若选择比默认值小的值，应用程序会将本该合并的组分分离。例如，在某个样品中，采用默认值则 +O_6 和 +O_7 可能会被分离（不提供峰的值）。

仅当在样品设置表格中按进样升序或降序输入样品时，合并才有效，因此按顺序采集的样品才会在该顺序中进行比较。例如：首次进样的样品、第二次进样的样品等，至最后进样的样品。



若将 Drift Tolerance 值设置为更大秒数（在本例中为 20 秒），则应用程序合并 +O_6 和 +O_7，为组分提供值。



范围：0.5 至 30.0 秒 默认值：2.4 秒

6. 设置一个强度比阈值以包括从最终结果中排除的峰，因为这些峰在控制文件中，但是在特定比率下高于样品文件中的峰。

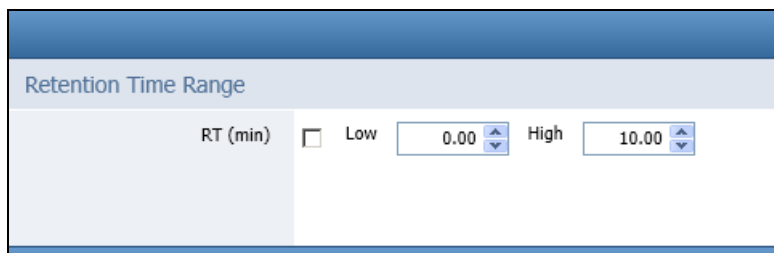
如果至少有一个时间点峰面积为所选值（ n ），组分保持并显示在 Data Review（数据查看）中。

有效值：2x、3x 或 5x 默认值：2x

定义保留时间范围

❖ 若要定义保留时间范围

1. 在 Retention Time Range（保留时间范围）区域内选择 RT（min）（保留时间，分钟）复选框，以排除超出母体药物及其代谢物范围的峰。



2. 为保留时间范围指定一个高低值以定义范围。
低值必须低于高值。

指定预计代谢物

当创建预计代谢物列表时，采用以下规则：

- 以加号或减号开始的分子式表示是否从母体分子式中增加或扣除。例如：+CH
- 输入有效的周期表元素符号。应用程序在用户离开该单元格后显示一条无效分子式输入的错误信息。例如：+QH +N displays an error（+QH +N 显示一个错误）。
- 根据需要重复相同元素。例如：+CHCH-CH 是有效的。
- 若要将加号改为减号或反之，在需要修改的第一个化合物之前指定新符号。否则应用程序将后面所有化合物的符号都定义为第一个碰到的符号。例如：+CH₂NH₂-CH₂ 与 +CH₂NH₂ CH₂ 并不相同。
- 对于化合物分子式，应用程序接受分子式内的空格。

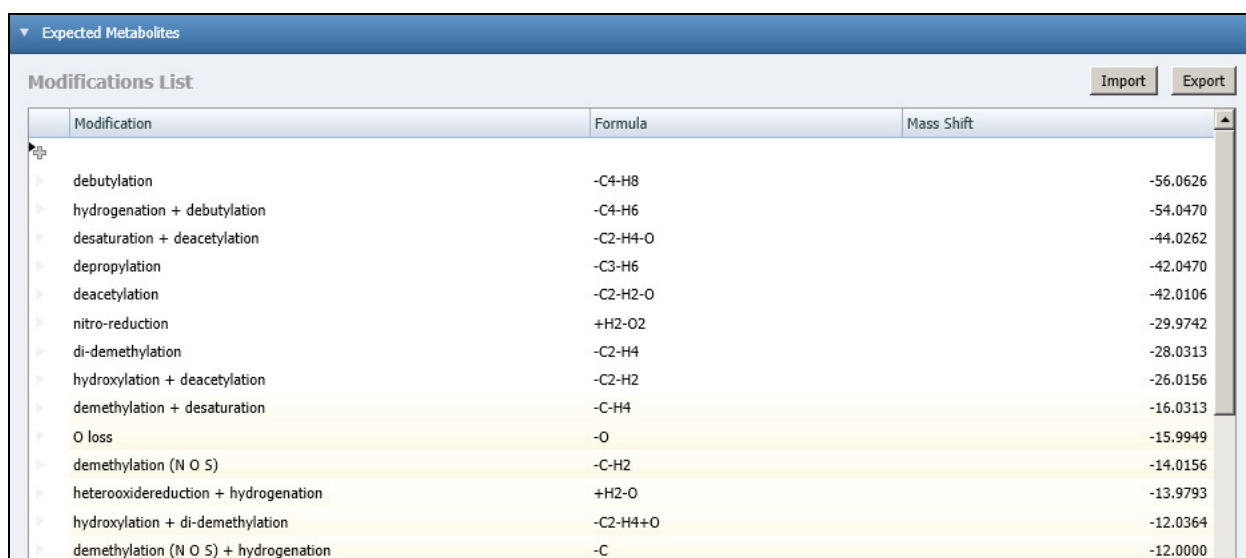
❖ 若要使用预计代谢物列表

1. 从 Expected Metabolites（预计代谢物）区域单击 **Import**（导入）从 Template（模板）文件夹（MetQuest_PhaseI_Common.csv 是默认文件）选择一个修饰列表，或用于当前处理方法的自定义列表文件。

除非该位置已被修改，否则应用程序会打开默认位置。假如位置被修改，MetQuest 应用程序打开最后定义的位置。

2. 单击 **Open**（打开）。

若要创建一个新列表文件或将代谢物添加到文件，参阅第 129 页的“使用代谢物修饰列表进行处理”。



Modification	Formula	Mass Shift
debutylation	-C4-H8	-56.0626
hydrogenation + debutylation	-C4-H6	-54.0470
desaturation + deacetylation	-C2-H4-O	-44.0262
depropylation	-C3-H6	-42.0470
deacetylation	-C2-H2-O	-42.0106
nitro-reduction	+H2-O2	-29.9742
di-demethylation	-C2-H4	-28.0313
hydroxylation + deacetylation	-C2-H2	-26.0156
demethylation + desaturation	-C-H4	-16.0313
O loss	-O	-15.9949
demethylation (N O S)	-C-H2	-14.0156
heterooxidation + hydrogenation	+H2-O	-13.9793
hydroxylation + di-demethylation	-C2-H4+O	-12.0364
demethylation (N O S) + hydrogenation	-C	-12.0000

3. 若要删除一行，利用左列选择该行，右击该行然后选择 **Delete**（删除）。
4. 若要在一个单元格中添加、复制或删除信息，选中单元格，右击然后选择合适的命令。
5. 若要添加行，在第一行添加单元格信息然后单击按下 ENTER（回车）。

列	描述
Modification（修饰）	预计修饰的名称。
Formula（分子式）	修饰类型的分子式变化（与母体分子式有关）。
Mass Shift（质量数变化）	当计算母体药物时，与代谢物修饰有关的质荷比（ m/z ）变化。

指定内标和元素组成设置

MetQuest 应用程序利用时间点 0 处的母体药物作为相对定量的参比。应用程序以相对百分比峰面积和绝对峰面积报告所有峰。

选择一个内标归一化每个数据文件内的峰，以避免仪器条件变化导致的运行间波动。在每个样品中加入相同量的内标。

按照如下步骤进行操作：

- 定义内标
- 设置总面积选项
- 定义元素组成值
- 修改高级谱图拟合值
- 定义峰容许标准

❖ 若要打开 ISTD/Elemental Comp 视图

从 Processing Setup 视图单击 **ISTD/Elemental Comp**（内标 / 元素组成）选项卡。

The screenshot shows the 'ISTD/Elemental Comp' configuration window, which is divided into several sections for defining internal standards and elemental composition limits.

Internal Standard		Elemental Composition Limits	
Name / ID	Glyburide	Nitrogen Rule	Even electrons
Formula	C23H28ClN3O6S <input type="button" value="Import"/>	Mass Tolerance (ppm)	5
MW	493.1438	RDB Equiv Low	-0.5
M+H+(m/z)	494.1511	RDB Equiv High	60.0
M-H-(m/z)	492.1365	Max Results	10
Sum Area Option		Advanced Spectral Fit Parameters	
	<input type="checkbox"/> Include Adducts	Expected Mass Error (ppm)	5
		Expected Intensity Error (%)	10
Peak Acceptance Criteria			
Min. # of Points Across a Peak	3		

定义内标

❖ 若要定义内标

1. 如果 ISTD/Elemental Comp 视图没有打开，从 Processing Setup 视图单击 **ISTD/Elemental Comp** 选项卡将其打开。

2. 在 Name/ID（名称 / 识别号）框中输入化合物名称。
默认情况下此框空白。
3. 利用下列方法之一添加内标分子式：
 - 如果有内标的 .mol 文件，单击 **Import**，从浏览框选择文件后单击 **Open**。
应用程序在适当区域显示来自文件的质量数、分子式和其他值。
 - 如果没有内标的 .mol 文件，在 Formula 框内输入分子式。
应用程序从分子式计算质量数和其他值。

参数	描述
Name/ID (名称 / 识别号)	为内标化合物输入名称。
Formula (分子式)	输入分子式用于计算或选择一个文件。
MW (分子量)	查看内标化合物的分子量。该值显示小数点后四位数字。 当输入分子式或选择文件后，应用程序显示该值。
M+H+ (m/z) (质子化， 质荷比)	如果实验运行模式为正离子模式，查看内标的质子化 m/z 值， 该值将用于数据处理。当输入分子式或选择文件后，应用程序 显示该值。
M-H- (m/z) (去质子化， 质荷比)	如果实验运行模式为负离子模式，查看内标的去质子化 m/z 值，该值将用于数据处理。当输入分子式或选择文件后，应用 程序显示该值。

设置总面积选项

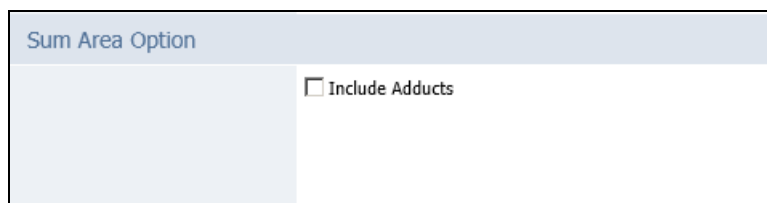
在 Sum Area Option（总面积选项）区域可以通过添加与组分有关的加合物峰面积，从而增加组分（代谢物或母体药物）的峰面积。增加峰面积带来更好的信噪比，使低水平组分不会轻易被总面积阈值掩盖。

如果选择这个选项，MetQuest 应用程序将加合物的峰面积添加到组分峰面积中，当计算相对定量值时可增加组分的峰面积。应用程序为正极性数据提供正加合物列表，为负极性数据提供负加合物列表。下表列出加合物列表中的加合物。无法修改此表中的加合物信息。

Formula（分子式）	Polarity（极性）	Mass Difference（质量数差值）
NH ₄	正	17.0265
Na	正	21.9819
K	正	37.9559
H ₃ C ₂ O ₂	负	58.0066
HCO ₂	负	43.9909
Cl	负	33.9610
H	负	2.0156

❖ 若要指定总面积选项

选择 **Include Adducts**（包括加合物）复选框将加合物面积添加到组分峰面积中。默认情况下不选中此框。



The image shows a software dialog box titled "Sum Area Option". Inside the dialog, there is a checkbox labeled "Include Adducts" which is currently unchecked. The dialog has a light blue header bar with the title and a white body area.

定义元素组成值

使用 Elemental Composition Limits (元素组成限值) 区域指定质谱图拟合参数, 应用程序利用这些参数计算分子式 (参阅表 6)。

应用程序执行下列操作:

- 利用理论 m/z 值确定质谱峰。
- 基于对某一个峰采集得到的平均扫描计算元素组成。
- 检查谱峰周围的一系列离子, 包括同位素。
- 根据同位素簇和同位素强度 (通常是单同位素质量) 计算所有候选元素组成。计算仅限于在 Sample Setup 视图中选中的所用元素。
- 采用 Fit Factor (拟合因子) 为每个候选组分的测量同位素和理论同位素分布之间的比较作个评分。仅当测量和理论同位素的分布和强度几乎相同时, 才能达到一个比较好的拟合因子 (100% 为最大值)。如果分布匹配不准确, 则拟合因子小于 100%。
- 将候选元素组成按照拟合因子降序排列。所选的最佳候选元素具有最佳拟合因子。

❖ 若要输入元素组成值

1. 选择是否在分子式计算中使用 Nitrogen Rule (氮规则)。

对于 LC/MS 分析, 选择 **Even Electrons (偶电子)**, 因为样品具有偶电子数。

有效值: Do Not Use (不使用)、Odd Electrons (奇电子)、或 Even Electrons

默认值: Even Electrons

Elemental Composition Limits	
Nitrogen Rule	Even electrons
Mass Tolerance (ppm)	5
RDB Equiv Low	-0.5
RDB Equiv High	60.0
Max Results	10

2. 若要限制可能的元素组成数量, 在 Mass Tolerance (ppm) (质量数容许偏差, ppm) 框内输入一个值。

有效值: 1 至 500 ppm 默认值: 5 ppm

仅当计算分子式在指定容许偏差内与输入质量数相匹配时, 应用程序返回元素组成检索结果。MetQuest 应用程序始终将这个质量数容许偏差值应用到元素组成计算中 (容许和单同位素质量数确定)。

4 使用处理方法

创建处理方法

- 若要设置环双键当量值 — 化合物中不饱和键数目的测量 — 计算得到具有化学意义的分子式，在 RDB Equiv Low（环双键当量低值）框和 RDB Equiv High（环双键当量高值）框内输入值。

有效值：-1 至 100 默认值（低）：-0.5 默认值（高）：100

- 通过输入值或单击 Max Results（最大结果数）框内的上下箭头指定结果的总数目。

有效值：1 至 10 默认值：10

表 6. Elemental Composition Limits 参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Nitrogen Rule（氮规则）	<p>选择是否在分子式计算中使用氮规则。对于 LC/MS 分析，选择 Even Electrons，因为样品具有偶电子数。</p> <p>选项：Do Not Use、Odd Electrons、或 Even Electrons</p> <p>默认：Even Electrons</p>
Mass Tolerance（ppm） （质量数容许偏差， ppm）	<p>指定质量数容许偏差以限制可能的元素组成数量。仅在计算分子式在指定容许偏差内与输入质量数相匹配时，应用程序返回元素组成检索结果。直接在框中输入整数。</p> <p>有效值：1 至 500 ppm 默认值：5 ppm</p> <p>应用程序始终将该质量数容许偏差值应用到元素组成计算中。如果仪器没有经过准确校正，可能需要提高质量数容许偏差。</p>

表 6. Elemental Composition Limits 参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
RDB Equiv Low (环双键当量值低值)	<p>查看或更改环双键当量范围的低值 — 化合物中不饱和键的数目 — 并将计算所得分子式限定为具有化学意义的分子式。</p> <p>有效值: -1 至 100 默认值: -0.5</p> <p>应用程序使用下列分子式:</p> $D = 1 + \frac{\sum_i^{i_{\max}} N_i (V_i - 2)}{2}$ <p>其中:</p> <ul style="list-style-type: none"> D 为 RDB 值 i_{\max} 为组分中不同元素的总数目 N_i 为元素 i 的原子数 V_i 为原子 i 的化合价 <p>计算结果若为整数, 比如 3.0, 则表明这是一个奇电子离子; 若余数为 0.5, 则表明这是一个偶电子离子。-0.5 为最小数值, 对应于一个已质子化的饱和化合物 (如 $[H_3O^+]$)。</p> <p>有效值: -1 至 100 默认值: -0.5</p> <p>这个值必须小于 RDB Equiv High 值。</p>
RDB Equiv High (环双键当量值高值)	<p>查看或更改环双键当量范围的高值 — 化合物中不饱和键的数目 — 并将计算所得分子式限定为具有化学意义的分子式。</p> <p>有效值: 0 至 100 默认值: 100</p> <p>这个值必须大于 RDB Equiv Low 值。</p>
Max Results (最大结果数)	<p>查看或更改期望 MetQuest 应用程序显示的最大结果数量。若需要增减, 则修改该值。</p> <p>有效值: 1 至 10 默认值: 10</p>

修改高级谱图拟合值

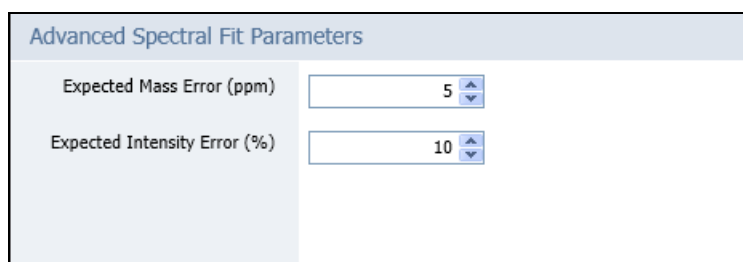
使用这些参数找到最佳匹配。

❖ 若要修改 Advanced Spectral Fit Parameters (高级谱图拟合参数) 值

1. 若要根据一个同位素峰的丰度测量其质量数误差，在 Expected Mass Error (ppm) (预计质量数误差, ppm) 框内输入一个值。

有效值: 0 至 100 默认值: 5

该选项确保丰度更大的峰质量数具有更小的百分比误差。



Advanced Spectral Fit Parameters	
Expected Mass Error (ppm)	5
Expected Intensity Error (%)	10

2. 若要根据一个同位素峰的丰度测量其强度误差，在 Expected Intensity Error (%) (预计强度误差, %) 框内输入一个值。

丰度更大的峰强度具有更小的百分比误差。有效值: 0 至 100 默认值: 10

参数	描述
Expected Mass Error (ppm) (预计质量数误差, ppm)	<p>Spectral Fit (谱图拟合) 算法比较理论和测量同位素质量数以及强度的差异。若要确定两个峰的质量数拟合水平, MetQuest 应用程序必须了解质谱仪的预计质量数误差。该参数指定了算法所用的质谱数据的预计质量数误差。</p> <p>为了获得最佳结果, 所设的预计质量数误差值必须使 98% 的质量数误差小于 Expected Mass Error 值。输入一个整数以单位 ppm 指定预计质量数误差。</p> <p>有效值: 0 至 100 默认值: 5</p>
Expected Intensity Error (%) (预计强度误差, %)	<p>应用程序比较理论和测量同位素质量数以及强度的差异。为了确定两个峰的强度拟合水平, MetQuest 应用程序必须了解质谱仪的预计强度误差。该参数指定了算法所用的质谱数据的预计强度误差。</p> <p>为了获得最佳结果, 所设的预计误差值必须使 98% 的强度误差小于 Expected Intensity Error 值。指定预计强度值为百分数。输入一个整数。</p> <p>有效值: 0 至 100% 默认值: 10%</p>

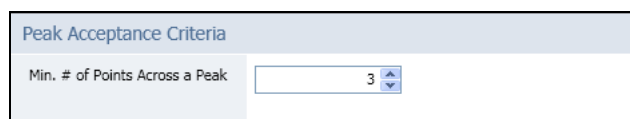
定义峰容许标准

❖ 若要定义峰容许标准

若要指定检索结果和报告中峰（组分、同位素或加合物）定义的最小点数，在 Min. # of Points Across a Peak（峰定义的最小点数）框内输入一个值。

有效值：3 至 20 默认值：3

如果将该值设得过高，可能会错过某些甚至所有峰。



应用程序在详细或总结报告的标题信息中报告这个参数。

保存处理方法

❖ 若要保存处理方法

1. 在任何处理方法视图中单击 **Save**（保存）打开一个对话框。
2. 为这个方法提供一个唯一的名称，便于以后处理。
3. 单击 **Save**。

修改处理方法

利用 Processing（处理）视图查看或修改处理方法。

重要信息 在修改处理方法后，即使方法名称不变，也必须将保存后的方法导入 Sample Setup 视图。

❖ 若要查看或修改方法

1. 单击 Processing 视图内的 **Open** 并浏览打开一个方法文件。单击 **OK**（确定）。
2. 选择一个已有方法。
保存方法打开，显示当前参数。
3. 在任何视图上修改参数值，并在任何处理方法视图内单击 **Save** 以同一名称保存方法。
 - 若要修改代谢物检索参数，参阅第 38 页的“设置代谢物检索参数”。
 - 若要修改元素组成参数，参阅第 44 页的“指定内标和元素组成设置”。
 - 若要修改报告设置，参阅第 28 页的“设置报告选项”。
4. 若要以新名称保存修改的方法，选择 **Save As**（另存为），输入新名称后单击 **Save**。

处理已采集的数据

若要处理已采集数据或重新处理数据，使用 Processing Only（仅处理）工作流程。如果第一次导入含样品信息的文件，单击 **New Experiment**（新实验）。处理信息的可能状况如下：

- 在用户没有定义处理方法时，处理时间过程样品的已采集数据（继续一个实验）
- 处理由 MetQuest 应用程序已采集和处理的样品，这样可以修改处理参数（一个连续的实验）
- 处理由另一个 Thermo Scientific 应用程序采集的样品，该程序创建一个 .sld 文件以定义采集和处理信息（一个新实验）
- 处理由另一个采用原始文件的 Thermo Fisher 软件产品已采集的样品（一个新实验）

有关创建或修改处理方法的更多信息，参阅第 37 页的“使用处理方法”。


目录

- 利用 MetQuest 应用程序处理采集数据
- 利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据
- 利用 .sld 文件处理采集数据
- 利用 Xcalibur 采集的原始文件处理数据

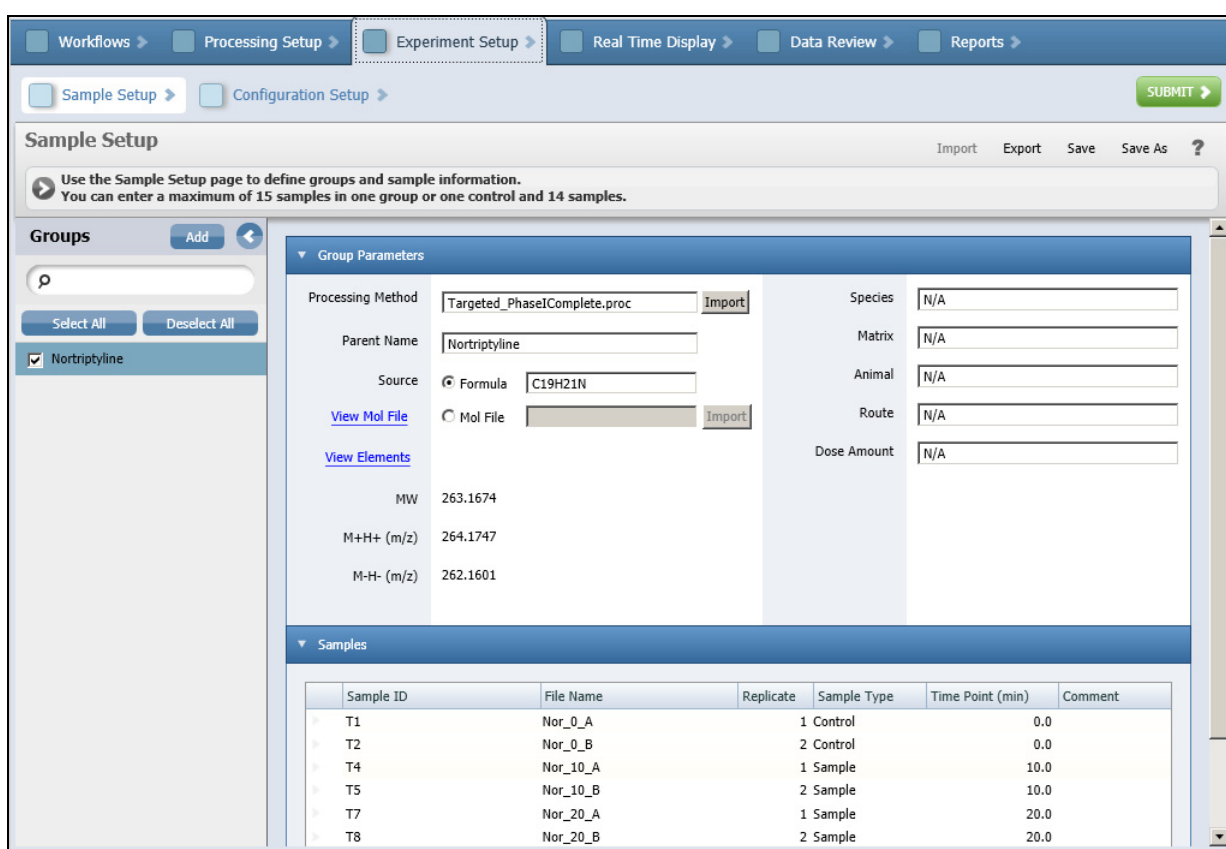
利用 MetQuest 应用程序处理采集数据

本部分说明如何利用 Acquisition Only（仅采集）实验类型处理采集数据。可以定义或修改处理参数，但是不能修改采集参数。

❖ 若要利用 Acquisition Only 实验类型处理采集数据

1. 单击  或选择 Start（开始）> Programs（程序）> Thermo > MetQuest 启动 MetQuest 应用程序。
2. 若要处理已采集的数据，单击 **Processing Only** 工作流程。
3. 若要处理实验，在 Select an Experiment（选择实验）列表中选择实验并单击 **Continue Experiment**（继续实验）。

应用程序显示 Sample Setup（样品设置）视图。



4. 在左侧的 Groups（组）区域选择一个组名。
5. 单击 **Import**（导入），浏览至一个处理方法，并选择一个方法，然后单击 **Open**（打开）。

对于一个含多个组的实验，从 Groups 区域选择一个组名，然后从 Group Parameters（组参数）区域单击 **Import** 以选择一个处理方法（.proc）。对实验中的所有组都执行该操作。若要创建一个处理方法，参阅第 38 页的“创建处理方法”。

MetQuest 应用程序在 Processing Method（处理方法）框中显示方法名称，然后打开默认位置的文件（除非用户更改位置）。假如位置更改，MetQuest 应用程序打开最后定义的位置。

6. 在 Configuration Setup（配置设置）视图中查看或修改配置选项。
7. 单击 **Save（保存）** 保存实验或单击 **Submit（提交）** 处理数据。

当提交实验进行重新处理时，应用程序移除所有提交组的处理文件，并利用新参数创建文件。应用程序处理修改的或新组文件，不论是正在添加组、删除组或处理实验的一部分。

如果 MetQuest 应用程序正在为一个仅采集实验采集数据，如果用户提交一个仅处理实验进行处理，应用程序会在仅采集实验完成后才开始仅处理实验。根据正在采集的样品数，处理可能被延迟。

一旦用户已经查看结果，可以修改处理方法以定义数据选择，并利用新参数重新处理数据。

利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据


利用这些方法修改并重新处理那些利用 MetQuest 应用程序采集和处理的实验。

- [处理全部实验](#)
- [处理部分实验](#)

处理全部实验

这个过程说明如何重新处理那些利用 MetQuest 应用程序采集和处理的数据。可以修改处理参数，但是不能修改采集参数。

❖ 利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据

1. 单击  或选择 **Start（开始） > Programs（程序） > Thermo > MetQuest** 启动 MetQuest 应用程序。
2. 若要处理已采集的数据，选择 **Processing Only** 工作流程。
应用程序显示已有的实验。

5 处理已采集的数据

利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据

3. 在 Select an Experiment 列表选择一个实验名称，即选择一个要处理的实验并单击 **Continue Experiment**。

应用程序显示 Sample Setup 视图。

4. 若要为一个组选择另一个处理方法 (.proc)，选择组名，单击 **Import** 选择一个方法然后单击 **Open**。

应用程序在 Processing Method 框内显示方法名称。根据需要为每组重复此步骤。若要修改一个已有的处理方法，参阅第 52 页的“修改处理方法”。

5. 在 Configuration Setup 视图中查看或修改配置选项。
6. 单击 **Save** 保存实验，然后单击 **Submit** 处理数据。
7. 若要复制实验，单击 **Save As**（另存为）。

MetQuest 应用程序提示为实验提供一个新名称。输入一个唯一的实验名称然后单击 **OK**（确定）。

当提交实验进行重新处理时，应用程序移除所有提交组的处理文件，并利用新参数创建文件。应用程序处理修改的或新组文件，不论是正在添加组、删除组或处理实验的一部分。

处理部分实验

一旦已经完成实验采集，就不能删除或修改已采集的组，除非重新处理实验。但是可以添加、采集和处理这些组。

如果实验中加入了新组，可能只需要处理实验的一部分。可以只选择要处理的新组，或选择重新处理任何已处理的组。如果采集或处理时出现错误，可以重新处理已处理的组。若要重新处理已处理的组，参阅第 55 页的“处理全部实验”。

❖ 若要在处理实验后添加组

1. 选择 **Processing Only** 工作流程。

应用程序显示已有的实验。

2. 单击 **Continue Experiment** 并选择打开一个实验。

3. 单击 **Sample Setup** 选项卡。

4. 在 **Groups** 区域单击 **Add (添加)** 添加一个新组并为其命名。

若要处理新组，导入原始文件。

5. 导入或输入组和样品详情。

有关添加组和样品详情的信息，参阅第 13 页的“定义样品信息以便采集”。

在单击 **Submit** 之前可以删除任何新添加组。当导入数据时，保存之前，以及提交实验以前，应用程序确认样品和组信息。在导入文件后可以连续修改有错误的实验。应用程序提供警告错误。不能提交或保存有错误的实验。

6. 若要处理组并生成报告，选择该组复选框并单击 **Submit**。

如果用户没有修改任何其他组，应用程序不会修改报告或重新处理这些组。

5 处理已采集的数据

利用 MetQuest 应用程序处理已采集和处理的数据

❖ 若要在处理后修改组信息

1. 打开实验。
2. 单击 **Sample Setup** 选项卡。
3. 在 **Groups** 区域选择组名显示组和样品信息。

修改组和样品详情。单击 **Submit** 时，MetQuest 应用程序确认所选组的新信息。

有关修改组和样品信息的信息，参阅第 13 页的“定义样品信息以便采集”。

4. 若要处理组，选择该组复选框并单击 **Submit**。

单击 **Submit** 时，MetQuest 应用程序确认所选组的新信息。

当提交实验进行重新处理时，应用程序移除所有提交组的处理文件，并利用新参数创建文件。应用程序处理修改的或新组文件，不论是正在添加组、删除组或处理实验的一部分。

在 **Review**（查看）视图中，应用程序显示当前实验所有组的有效结果，包括没有重新提交的组的原有处理结果，以及重新提交或添加的组的新处理结果。

如果从 **Data Review**（数据查看）视图单击 **Generate Reports**（生成报告），应用程序为实验的所有选中组创建报告。如果跳过 **Data Review** 视图，MetQuest 应用程序也为实验中的所有选中组创建 PDF 报告。


利用 .sld 文件处理采集数据

可以使用 MetQuest 应用程序处理采集数据，利用生成 .sld 文件的其他 Thermo Scientific 软件产品进行数据采集。可以处理在 LTQ Orbitrap 系列质谱仪或 Exactive 质谱仪上采集的数据，尽管这些系统没有运行 MetQuest 应用程序。

处理过程不会修改或移动原有文件。保存或提交实验后，MetQuest 应用程序复制原始文件，对其进行处理，并将副本放在 Thermo\MetQuest\Experiments 目录下。然后应用程序将其列在 Select an Experiment 列表上，这样可以再次打开文件，查看结果或重新处理。

.sld 文件可能包括一个仪器方法或处理方法，但是必须在导入文件后在 MetQuest 应用程序中识别这些方法。应用程序将所有样品放入当前选择组中，指定组信息的默认值。

❖ 若要处理采用其他 Thermo Scientific 软件采集的数据

1. 单击  或选择 **Start > Programs > Thermo > MetQuest** 启动 MetQuest 应用程序。
2. 若要利用 .sld 文件处理已采集的数据，选择 **Processing Only** 工作流程。
3. 单击 **New Experiment** 打开 Sample Setup 视图。

可择重命名该组。

4. 选择或创建样品信息组。

.sld 文件的所有信息进入组内。

5. 从 Sample Setup 视图单击 **Import**，然后选择 **.SLD Sample List (.sld 样品列表)**，浏览至一个列表，选择后单击 **Open**。

应用程序在样品列表中填充样品信息。

可以将样品信息导出为一个 .csv 文件，从而基于样品信息创建一个模板。单击 **Export (导出)** 创建 .csv 文件，包括与实验每个组相关的母体药物信息、组信息以及样品信息。导出文件与导入模板格式相同。有关使用导入模板创建导入文件的信息，参阅第 126 页的“[利用组和样品信息创建文件](#)”。

6. 为每组添加需要的母体药物信息和任何组信息。
7. 若要为某组选择一个处理方法 (.proc)，单击 Group Parameters 区域的 **Import**，浏览至一个方法，选择后单击 **Open**。

应用程序在 Processing Method 框内显示方法名称。

8. 除了 .sld 文件提供的信息，添加或修改下列样品信息：
 - 添加时间过程。
 - 为每个样品选择样品或控制样品类型。
 - 为每个原始文件提供合理的路径和文件名。

5 处理已采集的数据

利用 .sld 文件处理采集数据

9. 单击 **Submit** 处理数据。

如果应用程序提示用户提供一个实验名称，输入一个唯一的实验名并单击 **OK**。

当导入数据时，保存之前，以及提交实验以前，应用程序确认组和样品信息。不能提交或保存有错误的实验。

应用程序在 C:\Thermo\MetQuest\Experiments*experiment_name*\group_name*Acquired* 目录下保存原始文件和已处理文件的副本。

10. 单击 **Reports**（**报告**）选项卡查看实验报告。如果该实验未列出，单击 **Workflows**（**工作流程**）选项卡，选择 **Processing Only** 并在 Select an Experiment 区域内选择实验名称。

一旦采集、处理或保存实验，无法修改已有的组。可以添加实验组，删除或重新命名这些添加组，直到再次保存实验。

如果 MetQuest 应用程序正在为一个仅采集实验采集数据，如果用户提交一个仅处理实验进行处理，应用程序会在仅采集实验完成后才开始仅处理实验。根据正在采集的样品数，处理可能被延迟。


有关完成报告的更多信息，参阅第 104 页的“查看实验报告”和第 116 页的“打印报告”。

利用 Xcalibur 采集的原始文件处理数据

可以使用 MetQuest 应用程序处理其他 Thermo Scientific 软件产品采集的原始文件数据，例如 Xcalibur 数据系统。可以处理在 LTQ Orbitrap 系列质谱仪或 Exactive 质谱仪上采集的全扫描 AIF 数据，尽管这些系统没有运行 MetQuest 应用程序。

处理过程不会修改或移动原有文件。MetQuest 应用程序将样品表格中指定位置的原始文件复制到 `Thermo\MetQuest\Experiments\experiment_name` 目录，将其列在 Select an Experiment 列表中，这样可以打开文件、查看结果、修改处理信息并重新处理。

❖ 若要处理采用其他 Thermo Scientific 软件采集的原始文件

1. 单击  或选择 **Start > Programs > Thermo > MetQuest** 启动 MetQuest 应用程序。
2. 若要处理已采集的原始数据文件，选择 **Processing Only** 工作流程。
3. 单击 **New Experiment** 打开 Sample Setup 视图。
4. 选择或创建样品信息组。在识别样品文件之前输入组信息。有关定义组信息的更多信息，参阅第 16 页的“使用应用程序定义组信息”。
5. 从 Sample Setup 视图定义样品列表中的样品信息。为每个样品指定一个原始文件名和一个完整有效路径。
6. 添加或修改任何需要的样品信息：
 - 为每个样品添加时间过程信息。
 - 为每个原始文件提供合理的路径和文件名。
7. 在 Configuration Setup 视图中设置或显示配置选项。
8. 单击 **Submit** 处理数据。

基于样品文件的大小、组数目、重复样品数等，该过程可能较为冗长，因为 MetQuest 应用程序执行组分检测。

9. 如果尚未保存实验，MetQuest 应用程序提供一个实验名称。输入一个唯一的实验名称然后单击 **OK**。

应用程序在 `C:\Thermo\MetQuest\Experiments\experiment_name\group_name` 目录下保存原始文件和已处理文件的副本。

一旦已经查看结果，可以修改处理方法选项以定义峰选择，并利用这个程序重新处理数据。

有关完成报告的更多信息，参阅第 104 页的“查看实验报告”和第 116 页的“打印报告”。

5 处理已采集的数据

利用 Xcalibur 采集的原始文件处理数据

查看采集和处理状态

本章说明如何查看一个样品、一组样品或一个实验的采集和处理状态。查看数据之前根据第 13 页的“定义样品信息以便采集”和第 37 页的“使用处理方法”的说明提交样品。

目录

- [查看采集状态](#)
- [查看处理信息](#)

查看采集状态

使用 Real Time Acquisition Display（实时采集显示）视图查看样品采集状态，以评估采集状态。可以从采集队列中停止、启动、暂停和删除样品。

应用程序显示下列内容：

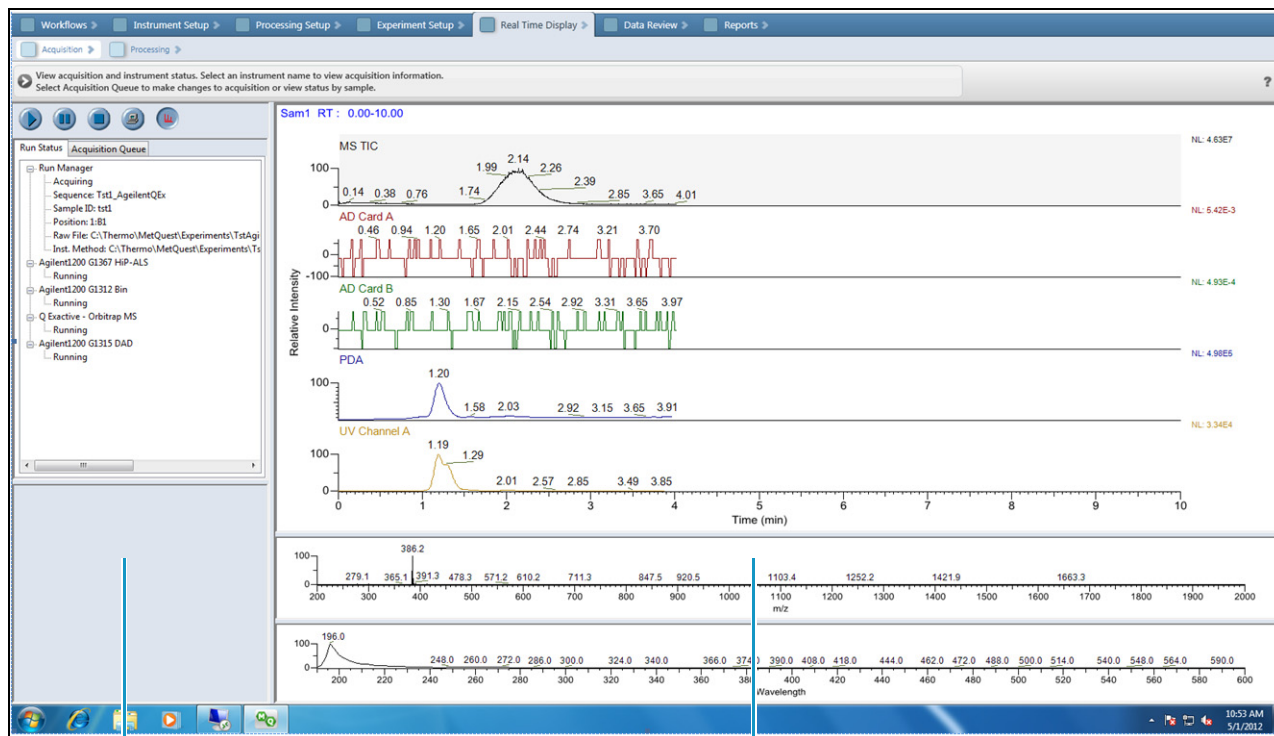
- TIC 色谱图
- 其他检测器，如 UV、A/D 卡和 PDA 的数据
- 质谱数据
- 设备状态
- 采集队列 Start/Stop/Pause（启动 / 停止 / 暂停）按钮
- 样品和序列信息

❖ 若要查看采集状态

1. 单击 **Submit**（提交）以将实验送至采集程序。

应用程序自动转至 **Real Time Display**（实时显示）视图。

应用程序显示 **Real Time Acquisition Display** 视图。



Status 视图

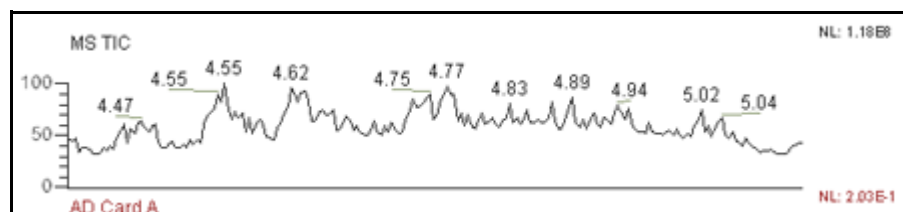
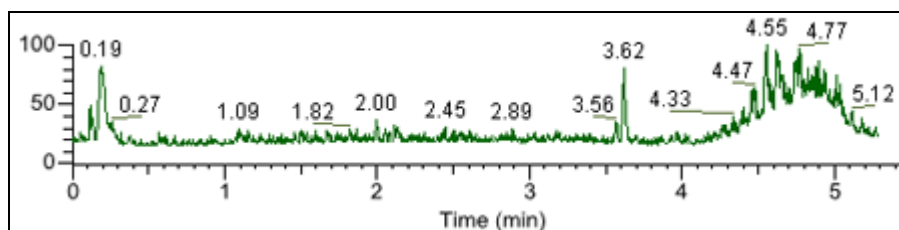
Data 视图

Status（状态）视图显示采集状态，Data（数据）视图显示正在采集的色谱和质谱数据。

对于下列选项，右击 Data 视图打开快捷菜单。

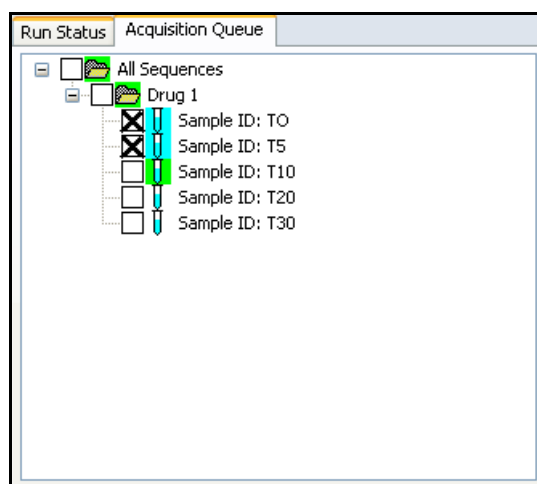
- Show Spectrum Trace（显示质谱图）：选择 **Show Spectrum Trace** 隐藏或显示质谱图。
- Copy to Clipboard（复制到剪贴板）：选择 **Copy to Clipboard** 复制图像。将图像粘贴到文档或电子表格。
- Reset Scaling（重置缩放比例）：若要改变比例和展览一个色谱图，可沿时间线拖曳光标。若要返回原始比例，右击色谱图窗口并选择 **Reset Scaling**。

上图显示原始视图。当对某个部分放大时，视图（参阅下图）显示所选区域（4.45 到 5.12）的更大视图。



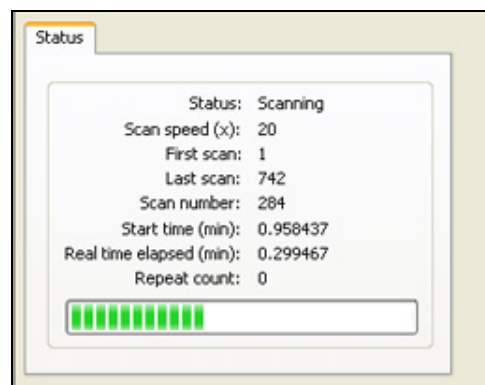
2. 单击 **Acquisition Queue**（采集队列）选项卡打开已提交样品列表。

当样品完成后，列表在已采集样品名称之前显示 X。



3. 若要查看采集队列中运行状态下方的设备状态，单击设备名称。

应用程序在 **Status** 区域显示设备的采集状态。



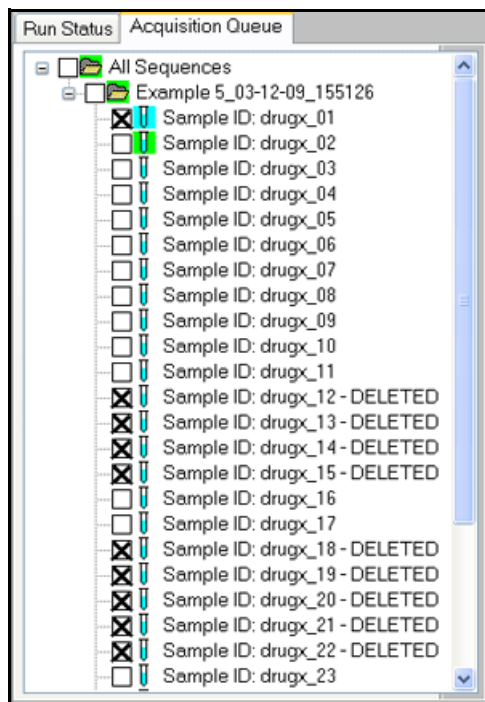
若要查看样品信息，右击复选框并从快捷菜单选择 **Sample Info**（样品信息）。应用程序显示样品信息。

6 查看采集和处理状态






查看采集状态

4. 若要从队列中移除一个样品或序列，可选中样品名称旁的复选框。单击 **Delete**（删除）从列表中移除样品。

应用程序将这些样品标记为已删除，且不会对其进行处理。



Real Time Display 视图顶部的下列按钮用于控制采集。

按钮	操作
	从暂停状态启动采集。
	暂停采集队列。如果应用程序正在采集某个样品，则继续采集该样品。如果单击 Go（前进），应用程序继续采集下一个样品。
	停止正在进行的样品采集，暂停采集队列。应用程序打开一个具有下列选项的菜单： <ul style="list-style-type: none">• 停止当前样品的采集并暂停。• 停止当前序列的采集并暂停。• 停止所有序列的采集。
	停止更新 Real Time Acquisition（实时采集）视图，但是对采集没有影响。
	隐藏质谱数据视图。

查看处理信息

MetQuest 应用程序以两种方式提供样品处理过程的状态和错误：可以在 Processing Display（处理显示）区域查看状态信息，或可以在应用程序完成处理实验后打开实验文件夹中的处理日志。（参阅第 70 页的“查看处理日志信息”了解更多保存和查看日志的信息）

- 查看 Processing Display 区域的信息
- 停止处理活动
- 查看处理日志信息
- 理解错误处理

查看 Processing Display 区域的信息

使用 Real Time Processing Display（实时处理显示）区域确定来自样品或样品组的采集数据是否已被成功处理。应用程序会显示用户是否在查看 Processing Display 页面的提示信息。用户也可以查看应用程序正在处理哪个实验和样品。当需要确定处理任务耗费时间时，该功能非常有用。应用程序还提供一种在任何组或实验水平停止处理的方式。但是在取消操作以后没有恢复功能。

❖ 若要打开 Real Time Processing Display 区域

1. 当用户处于实验界面或离开实验界面以后，打开 Real Time Processing Display 区域。

若用户已提交实验，应用程序自动转至 Real Time Processing Display 视图。

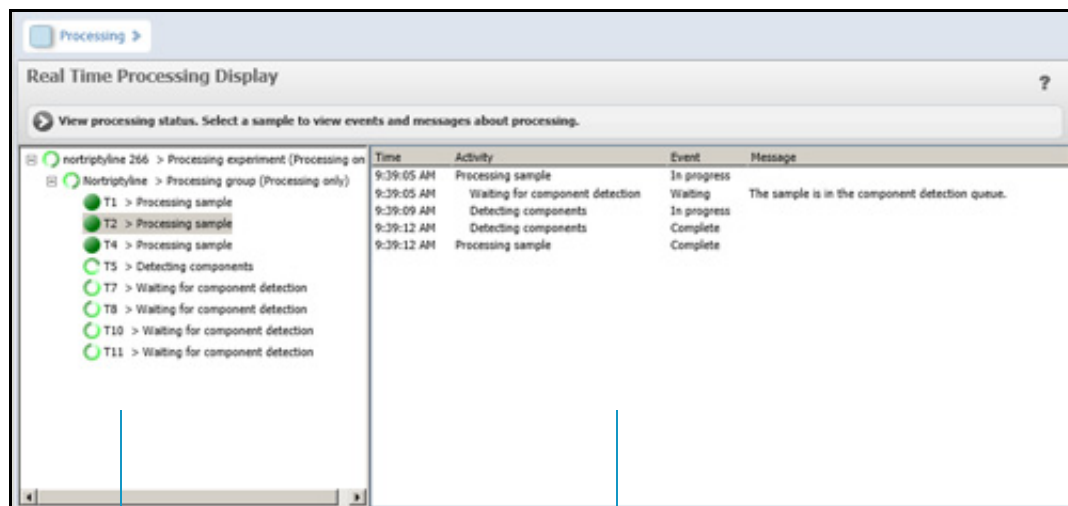
当用户离开实验界面而实验仍在处理时，若要查看有关实验的实时处理信息，执行以下操作：

- a. 打开应用程序。
- b. 选择 **Acquisition and Processing（采集和处理）** 或 **Processing Only（仅处理）**。
- c. 在 **Select an Experiment（选择实验）** 列表中选择实验并单击 **Continue Experiment（继续实验）**。
- d. 单击 **Real Time Display** 选项卡。
- e. 单击 **Processing（处理）** 选项卡。

Processing Status（处理状态）页面打开，显示实验正在处理中或等待处理中。

6 查看采集和处理状态

查看处理信息



实验列表

日志信息

2. 选择一个实验以查看处理状态。

应用程序显示实验中的所有组，在实验列表右侧显示实验的处理信息。

3. 选择一个组以查看这个组以及组内样品的处理信息。若要查看某个样品的详细处理信息，选择样品。

当应用程序正在处理一个单元，旁边的绿色圆圈继续移动。如果所选单元旁边有一个绿色实心圆圈，表示应用程序已经完成处理。一旦实验的所有样品和组都处理完毕，应用程序将会从显示中移除此实验。最近一次实验的处理信息会保留在屏幕上。

在 Real Time Processing Display 区域中，MetQuest 应用程序显示每个指定事件的信息：

- 事件起始时间
- 事件结束时间
- 事件结果，成功或失败，及失败的原因（若失败）
- 活动报告信息（例如，当序列等待时，采集活动报告采集开始或完成等等）

当应用程序仍在处理实验时，它在处理状态区域显示信息。当用户处理多个实验时，MetQuest 应用程序在 Processing Status 区域显示最近一次实验的处理信息。

停止处理活动

可以取消 MetQuest 应用程序内的数据处理。如果用户正在处理已采集数据或决定在处理过程中改变处理参数，或需要不按顺序处理另一个实验或组，该操作有效。取消处理对采集没有影响，因为应用程序只显示已经采集的实验。若要停止采集，参阅第 63 页的“查看采集状态”。

❖ 若要停止处理活动

1. 从处理列表选择一个或多个条目（样品、组或实验）。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Cancel（取消）** 以停止处理。

MetQuest 应用程序停止所选条目的所有处理活动，并执行以下操作：

- 删除所选单元的所有处理结果。
- 从处理队列移除所选组或实验。

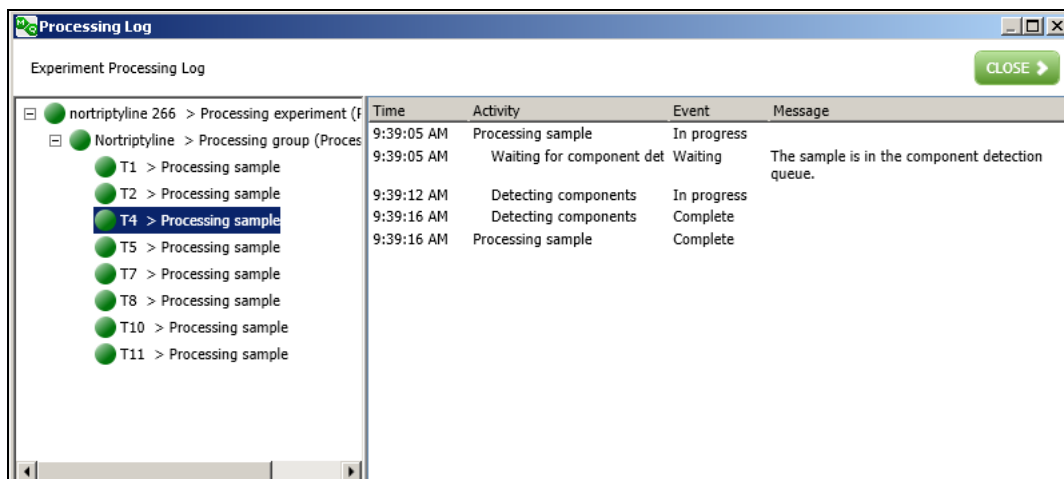
若用户在实验中停止一个或多个组的采集，应用程序处理已采集组。

查看处理日志信息

除了查看处理状态区域的处理信息，应用程序为每个实验记录日志，显示实验中样品和组的最终处理状态。应用程序在实验文件夹中保存这个日志（ProcessingLog.xml）。日志包括显示在处理状态区域的相同信息。在应用程序完成处理后，或如果应用程序无法处理信息，可以打开处理日志查看状态。使用这个日志查看处理时发生的错误。

❖ 若要从应用程序打开处理日志

1. 如果实验没有打开，则打开实验。
2. 单击 **Data Review**（数据查看）或 **Reports**（报告）选项卡。
3. 当显示打开时，单击 **Processing Log**（处理日志）。
4. 若要检查特定样品的处理信息，从样品列表中单击样品名。



❖ 若要打开实验文件夹中的处理日志

从 C:\Thermo\MetQuest\Experiments\experiment_name 文件夹单击 ExperimentProcessLog.xml 文件。

理解错误处理

对于某些样品处理错误，MetQuest 应用程序停止处理整个组。但是，应用程序可以处理具有某些样品错误的组，并生成组数据，但是信息不完整。

当处理一个实验时，应用程序响应以下类型的错误：

问题	响应
MetQuest 应用程序无法处理实验中某个样品（参阅以下详细示例）。	应用程序继续处理组内剩余样品并只计算已处理样品的 % Remaining（剩余百分比）值。对于无法处理的样品，应用程序不提供值（NV）。
<ul style="list-style-type: none">MetQuest 应用程序无法处理没有重复的单次进样分析中的时间点样品。	应用程序计算所有处理时间点的 % Remaining 值。应用程序将样品识别为 Excluded（已排除），显示至为 NV。无法在这个点之后包括这个样品。这个时间点不会出现在 Time Course（时间过程）图表内。
<ul style="list-style-type: none">MetQuest 应用程序无法处理控制重复样品。	应用程序基于那些成功处理的重复控制样品计算 % Remaining 值。应用程序为控制样品提供的值为 NV，用户无法将它们包括在样品结果中。
<ul style="list-style-type: none">MetQuest 应用程序无法处理时间点样品（在 Replicate（重复）分析中）。	应用程序计算所有处理时间点和样品的 % Remaining 值。使用成功处理的重复样品组中样品的值，应用程序为时间点计算平均 % Remaining 值，将未处理样品标记为 NV。无法包括这个点之后的样品。

6 查看采集和处理状态
查看处理信息

从应用程序查看结果

本章说明如何查看处理样品或样品组的结果。单击 **Data Review**（数据查看）选项卡查看、过滤或修改实验结果，或单击 **Reports**（报告）选项卡检查完成的报告。还可以查看描述采集和处理中事件和错误的日志文件。查看数据之前根据第 14 页的“定义样品信息”和第 37 页的“使用处理方法”的说明处理样品。

目录

- 利用 **Data Review** 查看和修改测试结果
- 查看实验日志结果
- 查看实验报告
- 处理实验 CSV 文件
- 打印报告

利用 Data Review 查看和修改测试结果

单击 Data Review 选项卡，在创建报告前后查看和修改所有实验数据。可以从 Data Review 视图将图像复制到剪贴板，将其粘贴到另一个软件中。如果没有任何要查看的实验，或想要查看一个成功处理的实验，应用程序提供样品数据以及可以打开及查看的报告。

- 查看组分结果
- 查看元素组成信息
- 在 Data Review 中处理组分结果
- 改变组分
- 保存 Data Review 中的修改
- 定义 Data Review 页面的报告选项

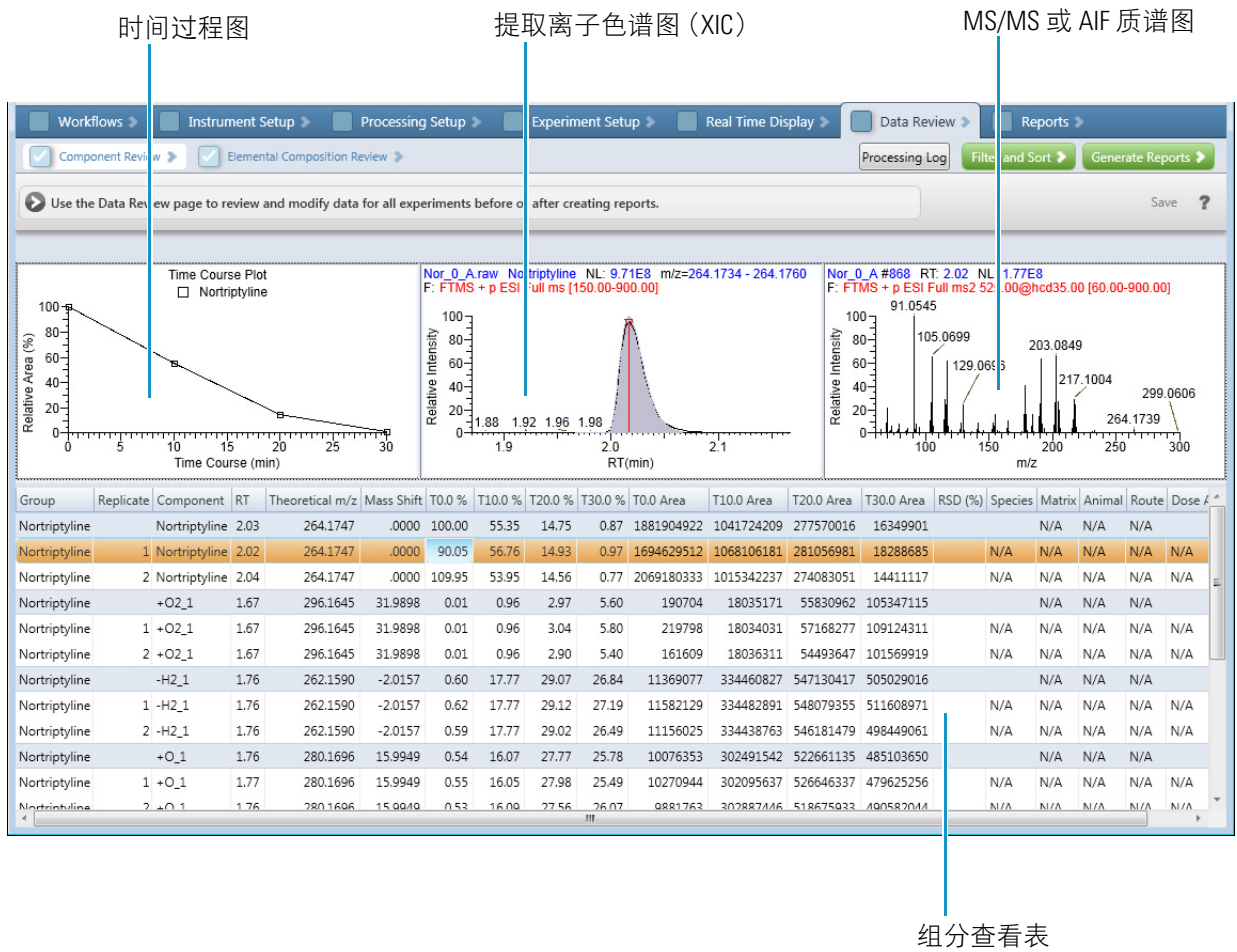
查看组分结果

如果仍在实验中，而数据处理已经完成，则应用程序自动移动到 Data Review。

❖ 若要查看 Data Review

1. 若要在应用程序关闭后查看实验结果，打开应用程序并选择工作流程：
选择 **Acquisition and Processing**（采集和处理）或 **Processing Only**（仅处理）。
2. 在 **Select an Experiment**（选择实验）列表中选择实验并单击 **Continue Experiment**（继续实验）。

3. 单击 **Data Review** 选项卡以打开 Data Review，显示包含所选实验首个样品结果的 Component Review（组分查看）表格。



❖ 若要从 Data Review 复制图像

1. 右击页面顶部的任意图形。
2. 从快捷菜单中选择 **Copy to Clipboard**（复制到剪贴板）。
3. 将图像复制到文件。

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

查看 Component Review 表

应用程序在表中保存处理结果，该表按照保留时间进行排序。使用该表可以选择一个时间点，应用程序显示所选时间点的图像。表格按照母体药物、ISTD 以及代谢物的顺序列出组分，在同一组内按照保留时间从小到大进行排序。Data Review 或报告中不包括空白样品。

对于具有重复样品的实验，结果表在平均行下方提供每个特定重复样品的数据，平均行显示基于已包括重复样品和时间点的平均结果。

可以从已处理数据中排除组分、进样、重复样品或时间点；但是，无法复制、修改或粘贴组分表值。有关排除组分的更多信息，参阅第 93 页的“改变组分”。

Group	Replicate	Component	RT	Theoretical m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	RSD (%)	Species	Matrix	Animal	Ro
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1747	.0000	100.00	55.35	14.75	0.87	1881904922	1041724209	277570016	16349901		N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1747	.0000	90.05	56.76	14.93	0.97	1694629512	1068106181	281056981	18288685		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.04	264.1747	.0000	109.95	53.95	14.56	0.77	2069180333	1015342237	274083051	14411117		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60	190704	18035171	55830962	105347115		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	3.04	5.80	219798	18034031	57168277	109124311		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.90	5.40	161609	18036311	54493647	101569919		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-H2+O_1	1.67	278.1539	13.9793	0.00	0.22	0.68	1.18	17774	4207528	12853548	22294083		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	-H2+O_1	1.67	278.1539	13.9793	0.00	0.22	0.67	1.24	17774	4216664	12679459	23368739		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-H2+O_1	1.67	278.1539	13.9793	NV	0.22	0.69	1.13	NV	4198393	13027637	21219427		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-C-H4_1	1.75	248.1434	-16.0313	0.00	0.29	1.11	1.48	42307	5546641	20882212	27888737		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	-C-H4_1	1.75	248.1434	-16.0313	0.00	0.30	1.09	1.52	58937	5647491	20447775	28583503		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-C-H4_1	1.76	248.1434	-16.0313	0.00	0.29	1.13	1.45	25676	5445791	21316648	27193972		N/A	N/A	N/A	N/A

选择组分

当打开实验结果时，应用程序高亮显示第一组第一个时间点的 $Tn\%$ 值。如果实验具有重复样品，应用程序高亮显示第一组第一个重复样品第一个时间点的 $Tn\%$ 值。

❖ 若要选择组分

当在 Data Review 中打开实验时，为组分选择下列选项之一：

- $Tn\%$ 用于查看 T0 处组分对母体药物的峰面积比
- $TnArea$ 用于查看组分峰面积

若要有助于查看和理解 $Tn\%$ 和 $TnArea$ 值之间的关系，当选择 $Tn\%$ 单元格时，应用程序使该单元格显示蓝色，并以橙色高亮显示对应的 $TnArea$ 单元格。当选择 $TnArea$ 单元格时，应用程序使单元格显示蓝色，以橙色高亮显示对应的 $Tn\%$ 单元格。应用程序根据所选单元格更新所有显示。使用 tab 键以及左右箭头键可以分别在 %T 和 $TnArea$ 区域移动。除此以外，也可以使用上下箭头键在单列中进行移动。仅可以在这两个区域选择单元格。

有关在表格中移动的信息，参阅第 81 页的“使用箭头键在组分表内移动”。

Group	Replicate	Component	RT	Theoretical m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	RSD (%)	Species	Matrix	Animal	Route
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1747	.0000	100.00	55.35	14.75	0.87	1881904922	1041724209	277570016	16349901		N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1747	.0000	90.05	56.76	14.93	0.97	1694629512	1068106181	281056981	18288685		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.04	264.1747	.0000	109.95	53.95	14.56	0.77	2069180333	1015342237	274083051	144111117		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60	190704	18035171	55830962	105347115		N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	3.04	5.80	219798	18034031	57168277	109124311		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline	2	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.90	5.40	161609	18036311	54493647	101569919		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline		-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.60	17.77	29.07	26.84	11369077	334460827	547130417	505029016		N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.62	17.77	29.12	27.19	11582129	334482891	548079355	511608971		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline	2	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.59	17.77	29.02	26.49	11156025	334438763	546181479	498449061		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline		+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.54	16.07	27.77	25.78	10076353	302491542	522661135	485103650		N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O_1	1.77	280.1696	15.9949	0.55	16.05	27.98	25.49	10270944	302095637	526646337	479625256		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline	2	+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.53	16.09	27.56	26.07	9881763	302887446	518675933	490582044		N/A	N/A	N/A	N
Nortriptyline		+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.17	5.91	7.91	4.89	3267612	111280170	148892392	92054056		N/A	N/A	N/A	

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

当实验具有重复样品时，应用程序取重复样品的平均值，在重复样品上方行中显示那些值。用户不能选择平均值，但是如果对包括或排除所选组分值作出修改，应用程序将会重新计算所有相关平均值。

表 7. 组分参数

参数	定义
Group (组)	查看组名称。
Replicate (重复)	查看特定重复样品数。应用程序对非重复实验显示默认值 1。
Component (组分)	查看组分名称。
RT (Retention Time, 保留时间)	查看组分峰的最高保留时间。应用程序对数据进行过滤以仅显示在 Processing (处理) 设置的 Metabolite Filtering Options (代谢物过滤选项) 部分中指定的 RT 范围内的代谢物。该值以分钟为单位。应用程序报告的保留时间精度为小数点后 2 位。
Theoretical m/z (理论质荷比)	查看理论 m/z 值 (基于组分检测, 而不是计算值)。应用程序报告的该值精度为小数点后 4 位。
Mass Shift (质量数变化)	查看母体药物和预计组分之间的质量数变化。应用程序在假定代谢物组分上扣除母体 m/z 的理论值。
Tn% (对于每个时间点)	查看 T0 ($n =$ 样品时间) 处组分对母体药物的峰面积比。
TnArea (对于每个时间点)	查看在选定时间点处剩余组分面积的整数部分 ($n =$ 样品时间)。
%RSD (相对标准偏差百分比)	查看内标平均值的相对标准偏差 (%RSD)。该值衡量测试的准确性和重复性, 定义测试的精确度。当具有重复样品时, 这个值特别有用。如果内标的 %RSD 值很低, 则精确度很高。应用程序报告值精度为小数点后 1 位。
Group Parameters (组参数)	在处理数据之前, 在 Sample Setup (样品设置) 页面上输入该值。
Species (种类)	查看每个样品的种类 (例如, 老鼠、人类或狗)。
Matrix (基质)	查看每个样品的基质类型 (例如, 血液或尿液)。
Animal# (动物编号)	查看动物识别号。
Route (途径)	查看途径: in vitro (体外) 或 in vivo (体内)。
Dose Amount (剂量)	查看剂量和测量类型。

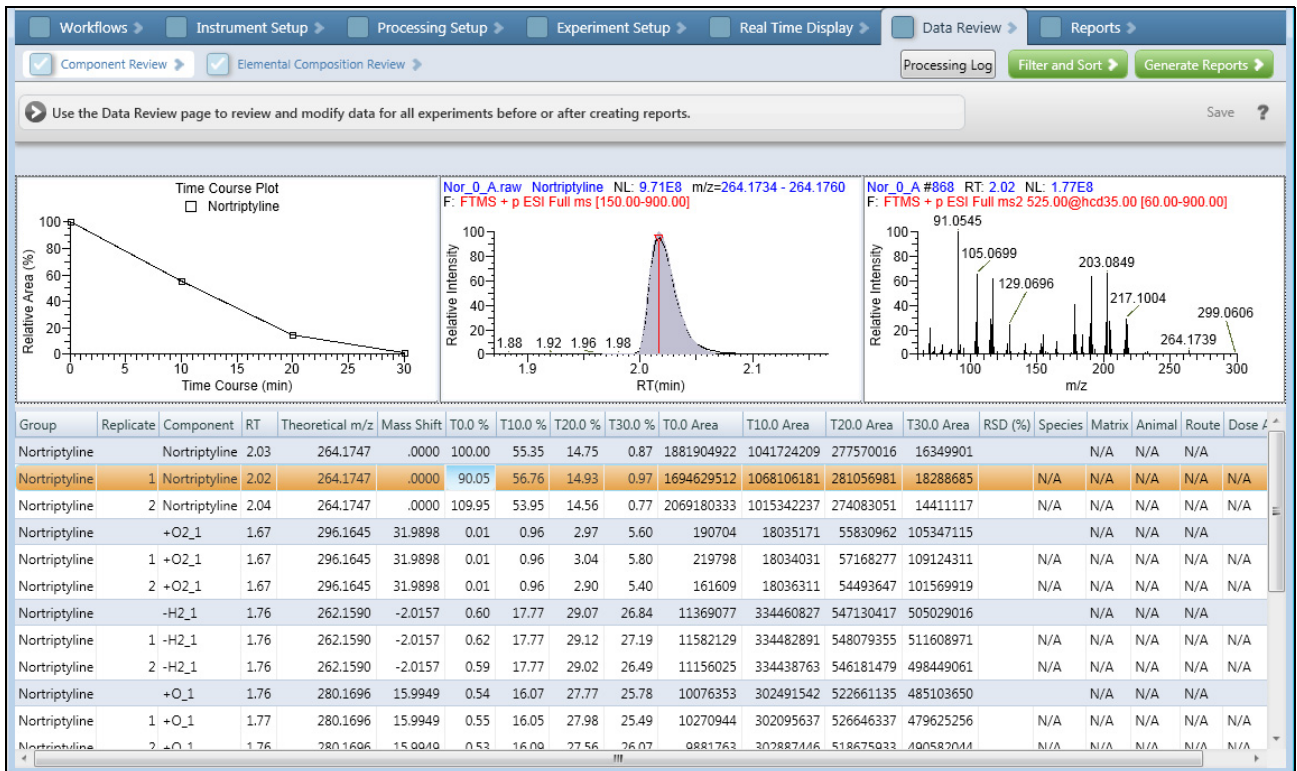
查看重复样品结果

应用程序在组分检测结束后取得重复样品的平均结果，并为所有成功采集的组分和已处理时间点提供面积值。

应用程序首先按照组，然后按照组分类型和名称将结果表中的条目进行分类，根据时间点从短到长排序。应用程序取得重复样品下列值的平均结果：RT、Tn% 和 TnArea。

❖ 若要查看重复样品结果

1. 如果实验没有打开，则打开一个已处理重复实验。
2. 单击 **Data Review** 选项卡并单击 **Component Review**。



7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

重复实验的组分表通过数字识别每个重复样品。当对每组重复样品进行平均时，应用程序计算组分内每个重复样品列的平均值，并在平均值行的单独列中显示平均值：

若要计算给出重复组分的 $Tn\%$ 和 $TnArea$ 的单独值，应用程序将

- 使用该公式计算每个时间点每个重复样品的剩余百分比值：

当没有内标时：

应用程序按照以下方式计算时间 T 处重复样品 y 的剩余百分比：

$$\text{剩余百分比} = 100 * (\text{时间 } x \text{ 处峰面积, 重复样品 } y \div T0 \text{ 的平均峰面积})$$

当有内标时：

应用程序按照以下方式计算时间 T 处重复样品 x 、 y 和 z 的剩余百分比：

$$\text{剩余百分比} = 100 * ([\text{时间 } t \text{ 处峰面积, 重复样品 } y \div \text{时间 } t \text{ 处内标峰面积, 重复样品 } y] \div [\text{重复样品 } t0 \text{ 处峰面积} \div \text{重复样品 } x \text{ } t0 \text{ 处内标}] + [\text{重复样品 } y \text{ } t0 \text{ 处峰面积} \div \text{重复样品 } y \text{ } t0 \text{ 处内标}] + [\text{重复样品 } z \text{ } t0 \text{ 处峰面积} \div \text{重复样品 } z \text{ } t0 \text{ 处内标}] \div 3)$$

Group	Replicate	Component	RT	Theoretical m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	RSD (%)	Species	Matrix	Animal	Route
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1747	.0000	100.00	55.35	14.75	0.87	1881904922	1041724209	277570016	16349901		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1747	.0000	90.05	56.76	14.93	0.97	1694629512	1068106181	281056981	18288685		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.04	264.1747	.0000	109.95	53.95	14.56	0.77	2069180333	1015342237	274083051	144111117		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60	190704	18035171	55830962	105347115		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	3.04	5.80	219798	18034031	57168277	109124311		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.90	5.40	161609	18036311	54493647	101569919		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.60	17.77	29.07	26.84	11369077	334460827	547130417	505029016		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.62	17.77	29.12	27.19	11582129	334482891	548079355	511608971		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.59	17.77	29.02	26.49	11156025	334438763	546181479	498449061		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.54	16.07	27.77	25.78	10076353	302491542	522661135	485103650		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	+O_1	1.77	280.1696	15.9949	0.55	16.05	27.98	25.49	10270944	302095637	526646337	479625256		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.53	16.09	27.56	26.07	9881763	302887446	518675933	490582044		N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.17	5.91	7.91	4.89	3267612	111280170	148892392	92054056		N/A	N/A	N/A	N/A

在处理期间，应用程序能够支持母体药物不在每个时间点和重复样品处存在的情况。

- 当计算剩余百分比值时，应用程序将缺少的控制样品视为已排除控制样品。
- 若组中每个重复系列中缺少控制样品，应用程序能够处理组并提供峰面积值，但无法计算剩余百分比值。
- 应用程序通过在修饰名称末尾添加一个序号来命名代谢物。

有关排除重复时间点带来的影响的信息，参阅第 98 页的“排除重复样品”。

使用箭头键在组分表内移动

❖ 若要在表内移动

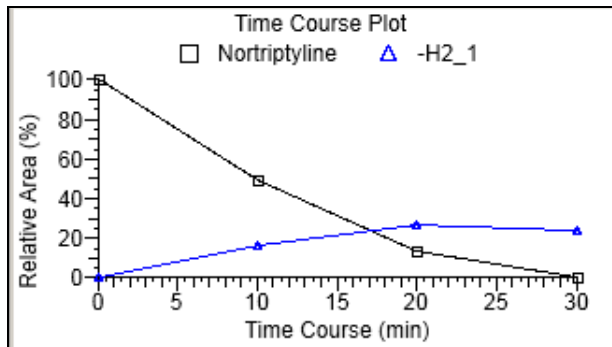
- 按下左箭头键（或 SHIFT + TAB）以移动到行中的左侧。当鼠标到达最左边的值时，按下左箭头键以移动到上一行最右侧的值。无法选择或移动到平均行。
- 按下右箭头键（或 TAB）以移动到行中的右侧。当鼠标到达最右边的值时，按下右箭头键以移动到上一行最左侧的值。
- 按上箭头键在列中上移。
- 按下箭头键在列中下移。

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

查看时间过程图

Data Review 功能限制时间过程图的组分数，只对当前所选组分和该组母体药物作图。如果选择母体药物，应用程序只在时间过程图中显示母体药物。



该图比较任意时间点的组分量与 T0（100%）处的母体药物量，并显示组分百分比。当重复样品存在时，应用程序对重复样品取平均值。时间过程图将 y 轴调整为当前图中最高点的高度。如果选择一个组分，而该图显示一个包含数百个母体药物的百分比，则可能需要重新查看信息或处理方法。可以复制时间过程图，将其粘贴到另一个软件中。

若要排除时间点，参阅第 95 页的“从组中排除时间点”。

查看提取离子色谱图 (XIC)

使用 Data Display (数据显示) 页面显示每个组分基峰的色谱图。提取离子色谱图 (XIC) 有时叫做单离子轮廓图。应用程序在 Data Review 和详细报告中提供所选组分的 XIC 色谱图。质量数范围为应用至质量数容许偏差的理论 m/z 。时间范围为峰顶保留时间加上或减去 ($1.5 * [峰宽]$)。若选择在总峰面积选项中包括加合物, 则应用程序将加合物峰面积包括在组分峰面积中。应用程序利用线条画出色谱图以定义出色谱图形状及峰面积, 并排除与化合物不相关的任何信息, 以提供一张简洁的色谱图。检查该视图以观察从基线到目标峰基线的积分区域。可以修改积分并放大局部查看细节。可以复制色谱图, 将其粘贴到另一个软件中。

可以以下列方式修改色谱图:

- 放大色谱图局部, 确保包括了所有组分。
- 手动积分色谱图以创建更理想化的积分 (参阅第 101 页的“手动积分组分”获取详细信息)。

当单击一个未找到峰 (NV) 的单元格时, 应用程序采用最强峰的最大保留时间及理论 m/z 创建 XIC、MS/MS 扫描、全 MS 扫描及元素组成结果。

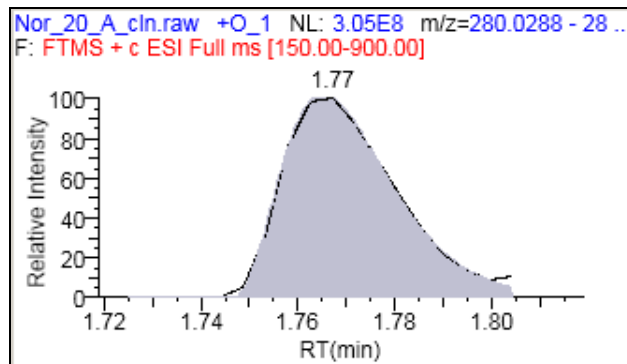
当用户手动对峰进行积分时, 应用程序采用手动积分峰的最大保留时间及理论 m/z 创建 XIC、MS/MS 扫描、全 MS 扫描及元素组成结果。

7 从应用程序查看结果

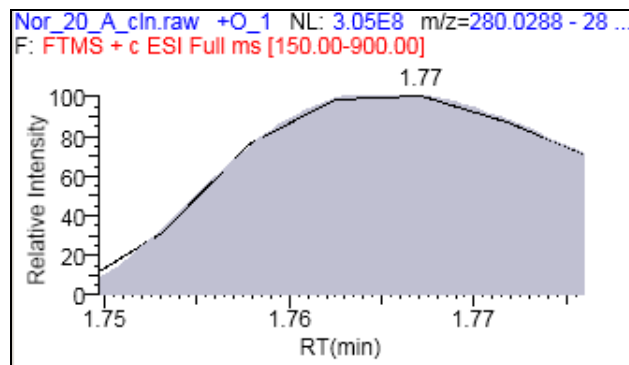
利用 Data Review 查看和修改测试结果

❖ 若要对色谱图作出可见修改

1. 当实验打开时，单击 **Data Review** 选项卡。
2. 若要修改视图，选择色谱图区域。



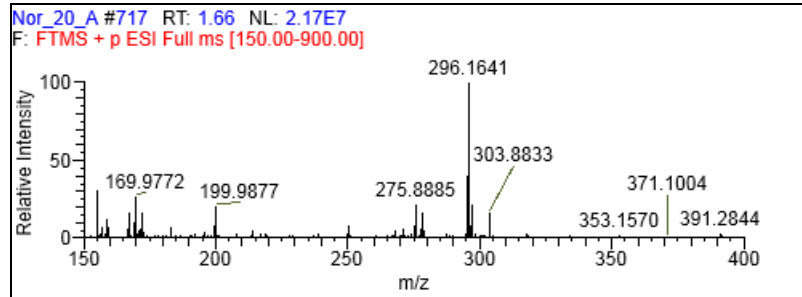
- 若要局部放大色谱图进行更加清晰的分析，单击 x 轴或色谱图的一部分，沿希望放大的区域拖曳光标。



- 若要使图像返回原始比例，右击并选择 **Reset Scaling**（重置缩放比例）。还可以选择 **Copy to Clipboard** 将色谱图粘贴到另一种格式的文档中。

查看 MS/MS 或 AIF 扫描

若要确定代谢物相对结构，或确定某个组分（假定代谢物）是否是母体化合物的真正代谢物，可使用 MS/MS 扫描中找到的碎片数据。应用程序在 Data Review 和详细报告中均显示该扫描。



可以复制 MS/MS 图，将其粘贴到另一个软件中。

应用程序按以下顺序选择 Exactive、Q Exactive 或 LTQ Orbitrap 组合式质谱仪的扫描。

- 若可用，数值 1 选项显示
 - 若不可用，则数值 2 选项显示，以此类推
1. 单个所选 FTMS MS/MS 扫描（使用母离子选择高分辨、准确质量数数据）
 2. 单个所选 ITMS MS/MS 扫描（使用母离子选择低分辨数据）
 3. 所有离子裂解（AIF）扫描（无母离子选择的裂解）。若 AIF 扫描为数据独立，则母离子 m/z 需要处于 AIF 扫描的扫描范围内。
 4. 没有扫描（没有可用的裂解扫描类型）

应用程序显示 MS/MS 质谱图标题的如下详细信息：

- 原始文件名
- 扫描数
- 保留时间
- 名义水平（NL）
- 扫描过滤器

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

查看元素组成信息

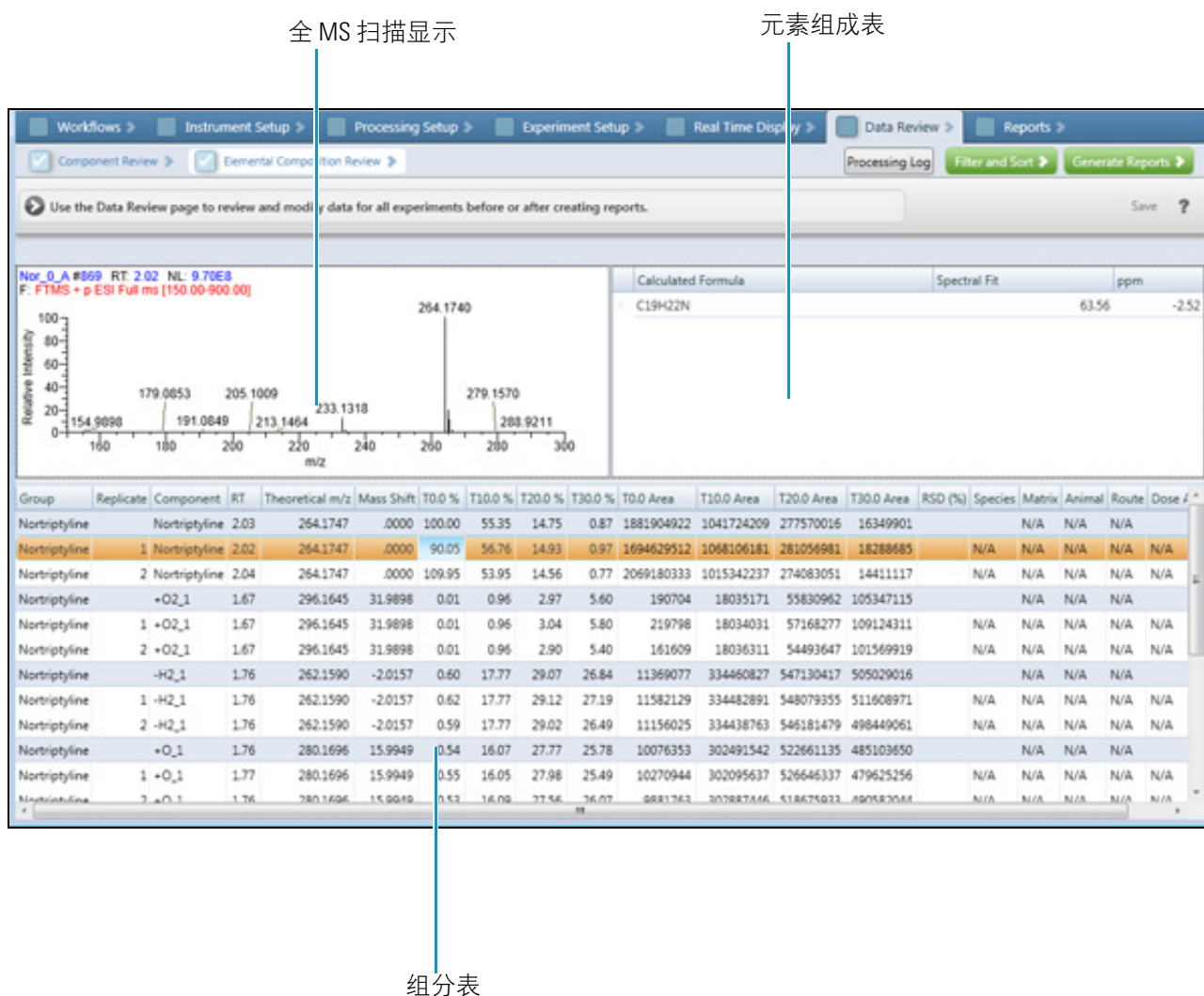
若要查看所选组分的准确质量数、全 MS 扫描轮廓图以及计算元素组成，单击 **Elemental Composition Review**（元素组成查看）选项卡。还可以修改组分表。有关管理组分表格的更多信息，参阅第 76 页的“查看 Component Review 表”。

- 查看元素组成结果
- 查看全 MS 扫描显示

有关修改组分表的信息，参阅第 93 页的“改变组分”。

❖ 若要查看组分结果

在 Data Review 视图，单击 **Elemental Composition Review** 选项卡查看组分结果。



查看元素组成结果

元素组成表包括计算元素组成。无法对元素组成表进行修改。

应用程序为母体药物以及预计修饰测定的元素组成计算准确性，衡量每个确定的元素化合物与目标化合物的理论 m/z 的偏差大小。应用程序在 Elemental Composition (元素组成) 表中以 ppm 准确性列显示值。如果相对真实值 100.0000 进行测量，应用程序显示值为 100.0001，测量偏差 0.0001。测量相当于百万分之一 (0.0001/100*1000000)。在这种情况下，因为测量值高于预期值所以结果为正。如果测量为 99.9999，应用程序报告了相同的 1 ppm 负偏差，这是因为测量值小于真实值。

❖ 若要查看元素组成表

在 Data Review 视图，单击 **Elemental Composition Review** 选项卡查看组分结果。

Calculated Formula	Spectral Fit	ppm
C15 H37 O7 N8	59.59	-2.53
C27 H33 N6	55.74	1.66
C26 H37 O4 N2	29.88	4.69
C31 H37 O2	29.07	-4.42

当用户在元素组成表中浏览或在 XIC 图中改变峰积分时，应用程序相应调整元素组成表中的条目。

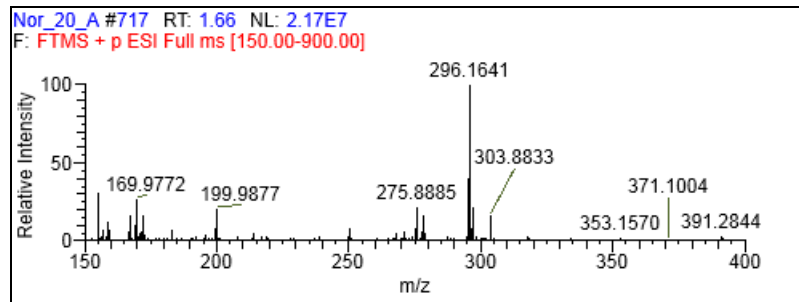
7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

查看全 MS 扫描显示

应用程序显示所选组分在峰最大保留时间处的的全 MS 扫描。全 MS 扫描显示在 Elemental Composition Review 选项卡及详细报告下的 Data Review 中。默认视图显示 x 轴，可以放大 x 轴和 y 轴以清晰查看理论组分 m/z 值及基线。

应用程序在全 MS 扫描标题中显示提供如下信息：原始文件名、扫描数、保留时间、名义水平（NL）和扫描过滤器。如果没有可用的全 MS 扫描，应用程序会在图像位置发出通知。



❖ 若要缩放全 MS 扫描显示

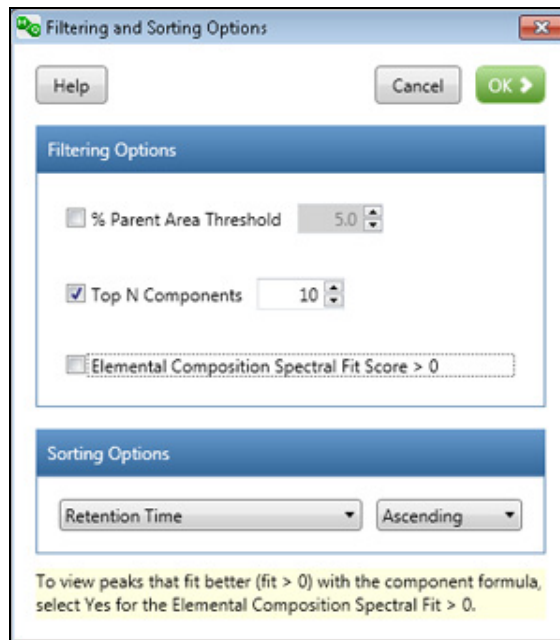
1. 若要局部放大全 MS 扫描显示，单击 x 轴并沿着要放大的区域拖曳光标。
2. 若要使图像返回原始比例，右击并选择 **Reset Scaling**。
3. 选择 **Copy to Clipboard** 将全 MS 扫描显示图粘贴到另一种格式的文档中。

在 Data Review 中处理组分结果

MetQuest 应用程序可以使用自定义过滤器过滤 Data Review 中显示的数据。应用程序对组分水平应用这些过滤器，并过滤或保留所有组分。若要使数据解释变得更简便，应用程序也可以在组内按以下值对数据进行排序：

- Retention time （保留时间）
- Intensity （强度）
- Mass shift from parent （相对母体的质量数变化）
- m/z value （ m/z 值）

若要在 Data Review 中对已经查看的数据进行过滤或排序，通过单击 **Filter and Sort**（**过滤和排序**）打开 Filtering and Sorting Options（过滤和排序选项）窗口并进行选择。



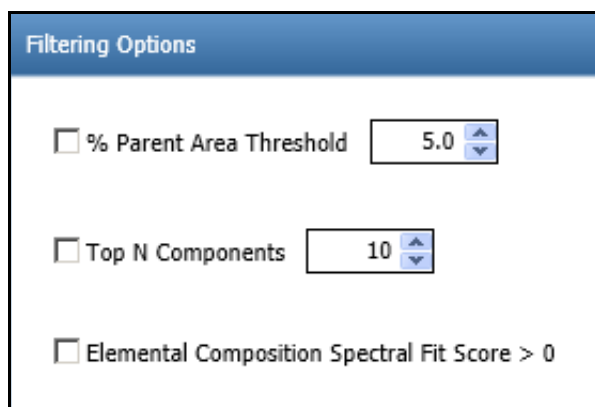
参阅这些部分，获取有关在 Data Review 中进行过滤和排序的信息。

- [在 Data Review 中过滤组分](#)
- [在 Data Review 中对元素进行排序](#)

在 Data Review 中过滤组分

❖ 若要过滤已查看数据

1. 在 Data Review 中，单击 **Filter and Sort** 以打开 Filtering and Sorting Options 窗口。
2. 若要隐藏那些小于母体峰面积指定百分比的峰，选中 Filtering Options（过滤选项）区域的 **% Parent Area Threshold**（母体峰面积百分比阈值）复选框并输入一个值。



若 T0 不可用或 T0 未找到，应用程序使复选框呈灰色。

有效值：0.0 至 100.0 默认值：5.0

3. 若要查看特定数量的组分，选中 **Top N Components**（前 N 个组分）复选框，然后选择需显示的组分数。

有效值：1.0 至 10.0 默认值：10.0

当多个组分具有相同的最大强度相对峰面积时，它们都显示在 Data Review 和报告中。

4. 若要查看与建议组分分子式拟合较好的峰（拟合 > 0）时，使应用程序放弃拟合为 0 的峰，并选中 **Elemental Composition Spectral Fit Score > 0**（元素组成谱图拟合分数 > 0）复选框。

应用程序比较理论和测量同位素质量数以及强度的差异，创建谱图拟合分数。若选中该复选框，应用程序仅显示谱图拟合分数为正的峰。

默认：不选中。

在 Data Review 中所作的修改，包括所选过滤选项，将反映在报告中。

若某个组分没有至少一个未排除的、数字的绝对峰面积单元格，该值与大于 0 的谱图拟合分数相关，则应用程序过滤整个组分。

如果某个组分具有至少一个未排除的、数字的绝对峰面积单元格，该值与至少一个大于 0 的谱图拟合分数相关，则应用程序在视图中包括整个组分（所有重复样品）。

应用程序仅对未排除单元格应用过滤器。

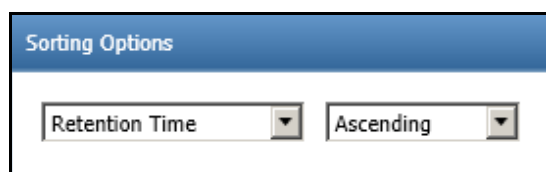
在 Data Review 中对元素进行排序

为了更简便地解释数据，MetQuest 应用程序能够根据不同值对组内的数据进行排序：

- Retention time
- Intensity
- Mass shift from parent
- *m/z value*

❖ 若要对已查看数据进行排序

1. 在 Data Review 中，单击 **Filter and Sort** 以打开 Filtering and Sorting Options 窗口。



2. 在 Sorting Options（排序选项）区域，选择一个排序方法：

- Retention Time（保留时间）
- Most Intense（%）（最大强度， %）
- Mass Shift（质量数变化）
- *m/z*（质荷比）

3. 选择 **Ascending**（升序）或 **Descending**（降序）作为排序顺序。

- Descending（从最大值至最小值）
- Ascending（从最小值至最大值）

在选择数据排序的方法以后，可以按照降序（从最大值至最小值）或升序（从最小值至最大值）进行排序。

当两个组分值相同时，保留时间低的那个首先出现在单元格中。

4. 单击 **OK**（确定）。

应用程序按用户定义的次序对单元格进行排序。

- 应用程序总是在平均行下方，按重复数从低到高对行进行排序。
- 应用程序继续执行指定的排序顺序。若用户排除或包括一个单元格，应用程序调整表格次序以匹配所作修改。
- 应用程序随实验一起保存排序顺序。

在组内，组分显示如下：

- 母离子总是首个组分。
- 如果存在内标，则内标为第二个组分。
- 所有其他组分的平均行按照用户的选择排序。

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

在以下示例中，Data Review 显示原始的数据次序：

Group	Replicate	Component	RT	Theoretical m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	RSD (%)	Species	Matrix	Animal	Route	Dose
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1747	.0000	100.00	55.35	14.75	0.87	1881904922	1041724209	277570016	16349901			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1747	.0000	90.05	56.76	14.93	0.97	1694629512	1068106181	281056981	18288685		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.04	264.1747	.0000	109.95	53.95	14.56	0.77	2069180333	1015342237	274083051	144111117		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60	190704	18035171	55830962	105347115			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	3.04	5.80	219798	18034031	57168277	109124311		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.90	5.40	161609	18036311	54493647	101569919		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.60	17.77	29.07	26.84	11369077	334460827	547130417	505029016			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.62	17.77	29.12	27.19	11582129	334482891	548079355	511608971		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.59	17.77	29.02	26.49	11156025	334438763	546181479	498449061		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.54	16.07	27.77	25.78	10076353	302491542	522661135	485103650			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O_1	1.77	280.1696	15.9949	0.55	16.05	27.98	25.49	10270944	302095637	526646337	479625256		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.53	16.09	27.56	26.07	9881763	302887446	518675933	490582044		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.17	5.91	7.91	4.89	3267612	111280170	148892392	92054056			N/A	N/A	N/A	

在按最强峰降序对数据进行降序排序以后，Data Review 显示为如下：

Group	Replicate	Component	RT	Theoretical m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	RSD (%)	Species	Matrix	Animal	Route	Dose
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1747	.0000	100.00	55.35	14.75	0.87	1881904922	1041724209	277570016	16349901			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1747	.0000	90.05	56.76	14.93	0.97	1694629512	1068106181	281056981	18288685		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.04	264.1747	.0000	109.95	53.95	14.56	0.77	2069180333	1015342237	274083051	144111117		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.60	17.77	29.07	26.84	11369077	334460827	547130417	505029016			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.62	17.77	29.12	27.19	11582129	334482891	548079355	511608971		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.59	17.77	29.02	26.49	11156025	334438763	546181479	498449061		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.54	16.07	27.77	25.78	10076353	302491542	522661135	485103650			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O_1	1.77	280.1696	15.9949	0.55	16.05	27.98	25.49	10270944	302095637	526646337	479625256		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.53	16.09	27.56	26.07	9881763	302887446	518675933	490582044		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.17	5.91	7.91	4.89	3267612	111280170	148892392	92054056			N/A	N/A	N/A	
Nortriptyline	1	+O_2	1.83	280.1696	15.9949	0.17	6.02	7.84	5.14	3117271	113383673	147591851	96651836		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.18	5.80	7.98	4.65	3417954	109176668	150192934	87456276		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60	190704	18035171	55830962	105347115			N/A	N/A	N/A	

改变组分

使用组分表格根据数据结果的检查，从已处理数据中排除组分、进样、重复样品或时间点。排除某个组分或时间点的理由可能如下：

- 组分形式（出现 / 不出现）可能与真实代谢物不一致。
- 观察到的碎片也可能与母体药物不一致。
- 组分相对母体药物的质量数变化可能与任何已知的或可解释的生物转化不一致。

在从计算中排除某个单元后，应用程序保留该单元，但是不会使该单元出现在任何生成的报告中。已排除单元显示为红色。

有关在 Data Display 保存修改的说明，参阅第 102 页的“保存 Data Review 中的修改”。

若要包括某个被排除的单元（高亮红色），右击并从快捷菜单选择合适的选项。

有关改变组分的信息，参阅本主题：

- [排除单个样品](#)
- [从组中排除时间点](#)
- [从实验的所有组中排除时间点](#)
- [从组中排除时间过程](#)
- [排除重复样品](#)
- [手动积分组分](#)

排除单个样品

使用 Data Review 排除单个样品（单个单元格排除）。由于进样错误、非正常内标表现或取样错误，用户可能选择排除单个进样。

应用程序从平均值计算中去除已排除的进样。另外，如果已排除单元格是内标，应用程序移除所有使用内标值计算的单元格。如果此单元格代表某个重复样品的最强峰，则次强峰决定该重复样品的保留时间，系统重新计算保留时间。

❖ 若要移除单个样品

1. 在样品表中选择样品。
2. 右击时间点并选择 **Exclude Component From Injection**（从进样排除组分）排除它。

若要再次包括某个时间点，右击并选择 **Include Component From Injection**（从进样包括组分）。

如果某个时间点是 T0 处的单个事件，应用程序排除该组。当这是另一个时间点的单个事件，时间点值从计算和 AD 图中被排除。应用程序自动在被排除点的每边两点之间画一条直线。被排除点不包括在报告中。

当从某个时间点排除了最近定义的峰面积或 %，应用程序报告平均值为 0，而不是 NV。

当该时间点是重复样品，应用程序自动重新计算所有平均值，不会在报告中包括任何被排除组分。

如果实验中某个已排除时间点的峰面积或 % 值均为 NV，则总结行报告平均值为 NV。如果只排除部分 NV 单元格，则 Average（平均值）行显示 NV。

如果某个时间点具有峰面积或 % 值，而排除该时间点后，应用程序在总结行中从平均值计算中去除这个值。

当某个单元格为 NV 时，意味着在采集或处理时有事件发生，无法获得样品值。这可能由于在采集之前某个样品被遗漏。用户可以选择包括或排除显示 NV 的列、行和单元格。应用程序对包含 NV 的单元格使用下列规则。

- 当某个组或实验内的一列（时间点）全部为 NV 时，应用程序不会去除时间点。可以手动排除该时间点（参阅第 95 页的“从组中排除时间点”）。
- 可以单击一个 NV 单元格以查看基于强度最大时间点（保留时间和质量数）的 XIC 色谱图及该单元格的全 MS 扫描，以验证该时间点处不存在峰。若存在峰，则可以手动添加它（参阅第 101 页的“手动积分组分”）。

从组中排除时间点

使用 Data Review 视图从某个组排除某个时间点（单列），这可能是由于进样错误、取样错误、内标错误、仪器错误等等。该步骤将去除整个组的时间点。应用程序不会在已生成报告中显示已排除的时间点。

如果实验中某个已排除时间点的峰面积或 % 值均为 NV，则总结行报告平均值为 NV。如果只排除部分 NV 单元格，则 Average 行显示 NV。如果某个时间点具有峰面积或 % 值，而排除该时间点后，应用程序在总结行中从平均值计算中去除这个值，并不在出现 / 不出现视图中显示该点。如果从某个时间点排除了最近定义的峰面积或 %，应用程序报告平均值为 0，而不是 NV。

❖ 若要排除组中时间点

1. 在样品表中选择一个时间点。
2. 右击时间点并选择 **Exclude Time Point From Group**（从组中排除时间点）排除它。
3. 若要再次包括某个时间点，右击并选择 **Include Time Point From Group**（从组中包括时间点）。

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

从实验的所有组中排除时间点

使用 Data Review 从整个实验排除某个时间点（单列），这可能是由于进样错误、取样错误、内标错误、仪器错误等等。该步骤将去除整个实验的时间点。应用程序将不会在出现 / 不出现视图中显示已排除的时间点或生成报告。

如果实验中某个已排除时间点的峰面积或 % 值均为 NV，则总结行报告平均值为 NV。如果只排除部分 NV 单元格，则 Average 行显示 NV。如果某个时间点具有峰面积或 % 值，而排除这个时间点后，在总结行中，应用程序将会在平均值计算过程中去除这个值。如果从某个时间点排除了最近定义的峰面积或 %，应用程序报告平均值为 0，而不是 NV。

❖ 若要排除实验中的时间点

1. 在样品表中选择一个时间点。
2. 右击时间点并选择 **Exclude Time Point From All Groups**（从所有组中排除时间点）排除它。
若要排除或包括所有时间点，使用 T0 列的时间点。
3. 若要再次包括某个时间点，右击该时间点并选择 **Include Time Point From All Groups**（从所有组中包括时间点）。

从组中排除时间过程

使用 Data Review 排除一个重复时间过程（单列），这可能是由于进样错误、取样错误、内标错误、仪器错误等等。该步骤将去除整个组的时间过程。应用程序不会在已生成报告中显示已排除的时间过程。

当实验中某个已排除行的峰面积或 % 值均为 NV 时，则总结报告显示空白。如果只排除部分 NV 单元格，则 Average 行显示 NV。如果某行具有峰面积或 % 值，而排除这行后，应用程序在总结行中从平均值计算中去除这个值。如果从某行排除了最近定义的峰面积或 %，应用程序报告平均值为 0，而不是 NV。

❖ 若要排除组中时间过程

1. 在时间过程中选择一个点。
2. 右击时间点并选择 **Exclude All Components From Injection**（从进样排除所有组分）排除这个时间过程。应用程序请求确认。
3. 选择 **Yes**（是）排除行或 **No**（否）使其保留在组或实验中。

如果在重复研究过程中删除一个平均时间过程，应用程序移除用于计算平均值的所有重复样品。

应用程序以红色显示已排除的点。

若要再次包括某个时间点，右击并选择 **Include All Components From Injection**（从进样包括所有组分）。

Group	Replicate	Component	RT	m/z	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T40.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area	T40.0 Area	ISTD CV	Species	Matrix	Animal	Route	Dose Amount
Nortriptyline		Nortriptyline	2.03	264.1741	0.0000	91.48	61.88	16.39	0.87	0.19	1550225814	1048565996	277744338	14765430	3292626		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	Nortriptyline	2.02	264.1740	.0000	100.00	62.99	16.59	1.08	NV	1694621152	1067508344	281056656	18288657	NV	NV	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	Nortriptyline	2.05	264.1742	.0000	122.25	59.92	16.16	0.86	0.12	2071652218	1015344603	273795595	14518563	2045510	NV	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	3	Nortriptyline	2.01	264.1742	.0000	52.19	62.72	16.43	0.68	0.27	884404074	1062845041	278380764	11489071	4539742	NV	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		+O2_1	1.67	296.1641	31.9898	0.00	1.19	3.51	6.23	10.82	0	20189596	59557579	105578457	183274568		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	+O2_1	1.67	296.1641	31.9898	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	+O2_1	1.67	296.1641	31.9898	NV	1.19	3.51	6.23	10.82	NV	20189596	59557579	105578457	183274568		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	3	+O2_1	1.67	296.1641	31.9898	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV	NV		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline		-C-H2_1	1.67	250.1588	-14.0157	0.00	0.07	0.27	0.51	0.86	0	1207893	4569522	8653882	14536778		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	1	-C-H2_1	1.69	250.1588	-14.0157	NV	0.07	NV	0.52	0.86	NV	1207893	NV	8860545	14535283		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	2	-C-H2_1	1.67	250.1587	-14.0157	NV	NV	0.27	0.52	0.86	NV	NV	4569522	8811470	14538273		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
Nortriptyline	3	-C-H2_1	1.65	250.1588	-14.0157	NV	NV	NV	0.49	NV	NV	NV	NV	8289632	NV		N/A	N/A	N/A	N/A	N/A

若要保留时间过程中的一个单元格，参阅第 101 页的“手动积分组分”手动包括它。

7 从应用程序查看结果

利用 Data Review 查看和修改测试结果

排除重复样品

对于包含重复样品的实验，应用程序支持排除由于以下常见错误而导致无法使用的重复样品：

- 进样错误
- 取样错误
- 内标错误
- 仪器错误

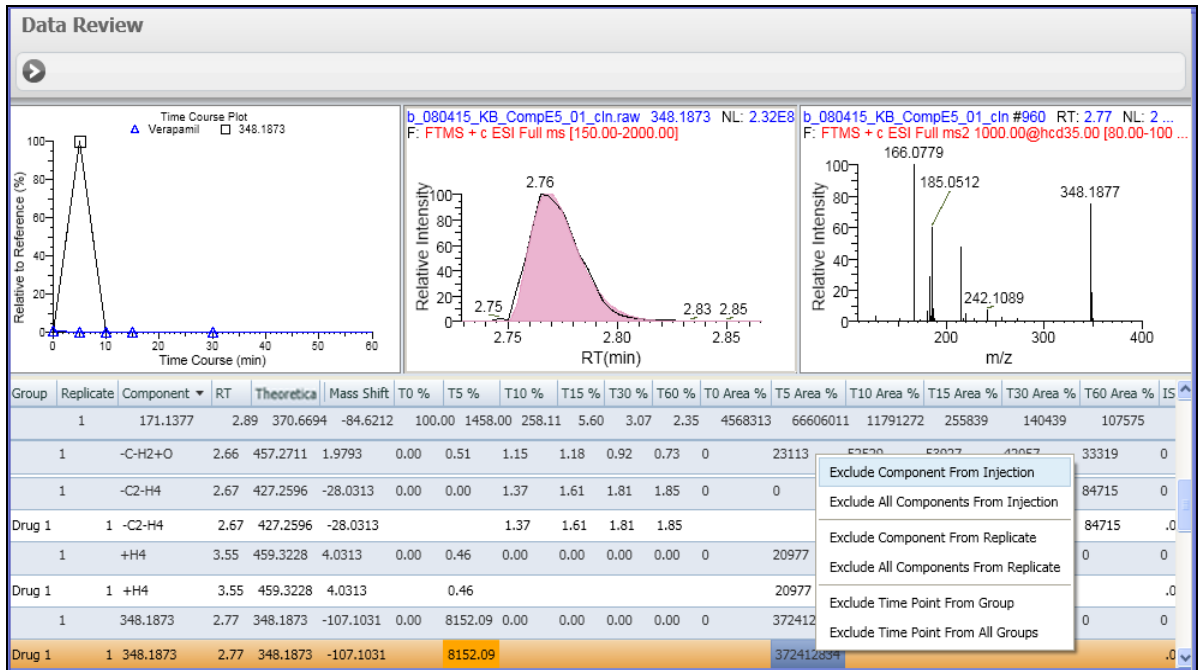
已排除重复样品不用于平均结果计算。当排除某个重复样品时，应用程序自动计算这些结果。如果排除某个组分，应用程序排除该组分的任何重复样品。当排除重复样品时，这些规则适用：

- 可以排除 T0 控制样品，因为系统从剩余 T0 控制样品的平均值计算该值，即使只剩下一个 T0。
- 当排除一个 T0 值时，应用程序计算一个新的平均 T0 值，并根据新平均值重新计算所有时间点。
- 当排除某个时间点的任何重复样品时，应用程序计算该时间点的新平均值。
- 当无法采集或处理单个样品时，应用程序将其显示为 NV。该样品不用于任何计算，包括重复样品数。
- 若要排除一个平均行，可排除该样品所有相关重复样品。

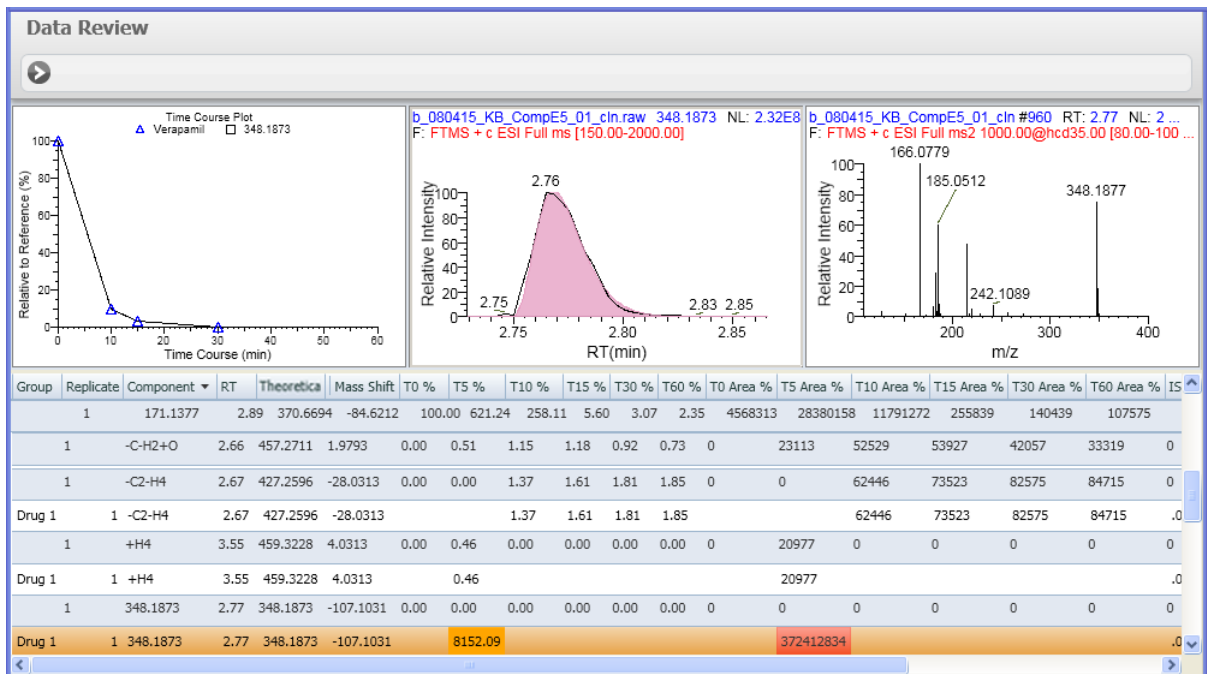
以下示例在母体药物的 8152.09% 显示一个时间点。该点可能是污染物，所以可以从数据查看图和报告中移除这个点。



若要移除这个点并更加清楚地看到母体药物的出现 / 不出现曲线，右击该点的峰面积值，并选择 **Exclude Component From Injection**。



排除该点后，应用程序以红色显示该点，从相关平均值中排除这个点，并校正来自更新的平均行的图。如果选择删除点，应用程序显示质谱图，这样可以看到为什么删除这个点。



❖ 若要排除重复样品

1. 选中重复样品。
2. 采用以下选项之一去除重复样品：
 - 若要移除单个时间点，右击该时间点并选择 **Exclude Component From Replicate**（从重复样品排除组分）排除它。
若要再次包括某个时间点，右击并选择 **Include Component From Replicate**（从重复样品包括组分）。
 - 若要移除一个完整的时间过程系列（一行），右击该时间点并选择 **Exclude All Components From Replicate**（从重复样品排除所有组分）排除它。
若要再次包括某个时间点，右击该时间点并选择 **Include All Components From Replicate**（从重复样品包括所有组分）。
 - 若要排除某个组的时间点的所有条目，右击该时间点并选择 **Exclude Time Point From Group** 排除它。
若要再次包括某个时间点，右击该时间点并选择 **Include Time Point From Group**。
 - 若要排除某个实验的时间点的所有条目，右击该时间点并选择 **Exclude Time Point From All Groups** 排除它。
若要再次包括某个时间点，右击该时间点并选择 **Include Time Point From All Groups**。

在排除所需单元之后，应用程序在设置选中 / 未选中状态并重新计算平均值之后，使用户移动到最近一次的选择。应用程序也修改所有显示以反映所有修改。

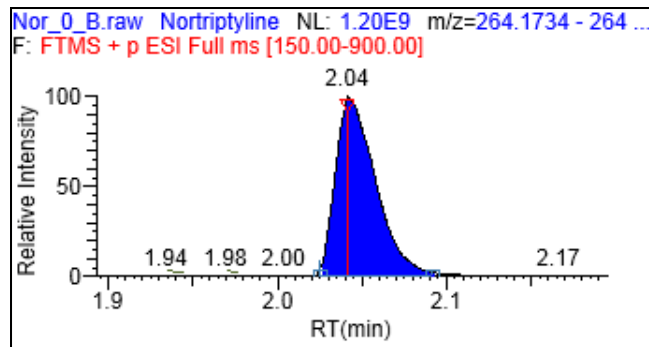
手动积分组分

使用 Data Review 修改任何不正确的积分。一个天然存在的组分可能已经分为两个或更多较小的峰。若要将较小峰的峰面积包括到较大组分峰中，可以放大峰（ x 轴和 y 轴缩放）及利用色谱图视图手动添加或排除峰面积。应用程序立即更新峰面积百分比表和 Time Course（时间过程）图。

❖ 若要在色谱图中执行手动积分

1. 如果某个实验尚未在 Data Review 中显示，则将其打开。
2. 选择样品。
3. 若要包括一个邻近峰，右击并选择 **Use Manual Peak Integration**（使用手动峰积分）。
4. 从基线开始拖曳光标将待积分区域全部包括进去。

当释放鼠标按钮时，应用程序更新样品值，以包括第二个峰。应用程序以深蓝色显示最新定义的面积。



当在 T0 手动积分母体药物时，应用程序重新计算所有相关面积。

当手动积分任何内标时，应用程序重新计算所有使用内标计算值的组分的相对峰面积。

当在 T0 手动积分任何非内标或母体药物的峰时，应用程序将会更新这个峰的绝对峰面积和相对峰面积。

若要检查结果，右击新峰并选择 **Use Automatic Integration**（使用自动积分）以显示原始峰。若要保存修改并将其显示在报告中，单击 **Save**（保存）。

对于所有手动积分峰，应用程序更新最大保留时间、峰面积、相对峰面积、全 MS 扫描，最佳 MS/MS 扫描及元素组成结果。

保存 Data Review 中的修改

❖ 若要保存对 Data Review 的修改

在对 Data Review 的两项视图均作出修改后，单击 **Save**。

应用程序将 Data Review 的当前状态保存为一个文件。

当用户单击 Save 时，应用程序将会保存包括自动积分结果、手动积分结果、包括 / 排除状态、重新计算的峰面积及剩余百分比在内的所有结果。

当单击 Generate Reports（生成报告）时，应用程序自动保存用户所作的修改。如果在选项卡之间切换或关闭应用程序，应用程序将会提醒用户保存所作修改。

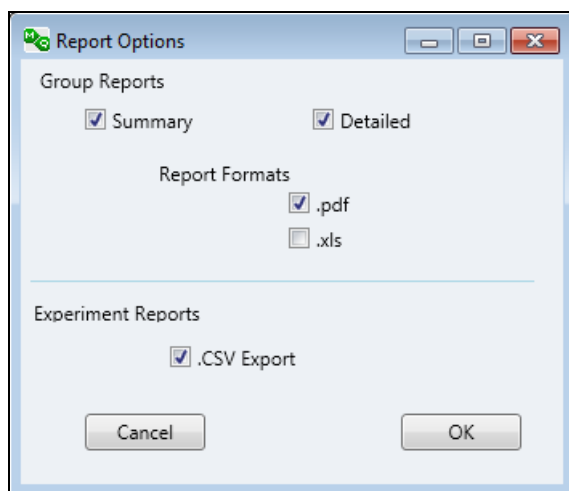
定义 Data Review 页面的报告选项

在修改实验处理结果之后，可以生成包括修改的报告。报告类型包括组水平总结和详细报告及实验水平 CSV 报告。

❖ 若要在查看数据之后创建报告

1. 若要从 Data Review 创建报告，单击 **Generate Reports**。

应用程序打开一个显示报告选项的 Reports Options（报告选项）对话框。这些选项按处理方法中的选择设置。

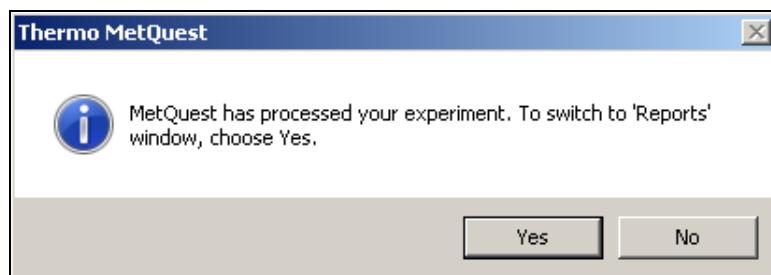


若要修改报告选项，参阅第 28 页的“设置报告选项”。若要显示报告处理，应用程序在 Real Time Processing Display（实时处理显示）区域打开 Processing（处理）区域。

对话框中的修改不会改变实验设置。若要修改实验设置，单击 **Experiment Setup**（实验设置）选项卡然后单击 **Configuration Options**（配置选项）。

- 单击 **OK** 以生成报告或单击 **Cancel**（取消）以关闭对话框且不创建报告。

当用户单击 OK 时，应用程序处理报告并将其保存到实验文件夹。在处理报告之后，应用程序显示以下信息：



- 单击 **Yes** 进入 Reports 视图。

应用程序转至报告页面，并显示报告的动态列表，可以在列表中单击报告名称以查看报告（参阅第 104 页的“查看实验报告”）。

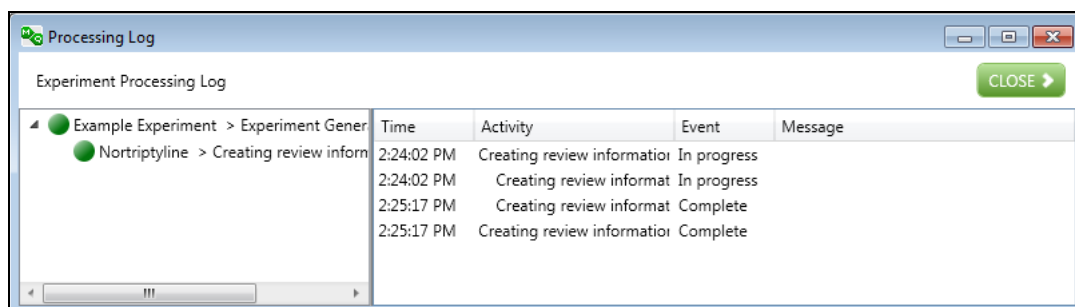
查看实验日志结果

应用程序保留采集和处理事件，以及所有实验错误的记录。在处理实验之后，应用程序将日志（ProcessingLog.xml）保存在实验文件夹中。该日志包括组内每个样品的处理，组的处理（事件过程的创建、报告等）和每个实验的完成信息。

❖ 若要在应用程序内查看实验日志

- 打开一个实验。
- 在 Data Review 或 Reports 视图中，单击 **Processing Log**（处理日志）。

应用程序显示打开实验的日志。



- 若要查看某个特定时间点的采集和处理信息，选择该时间点。

查看实验报告

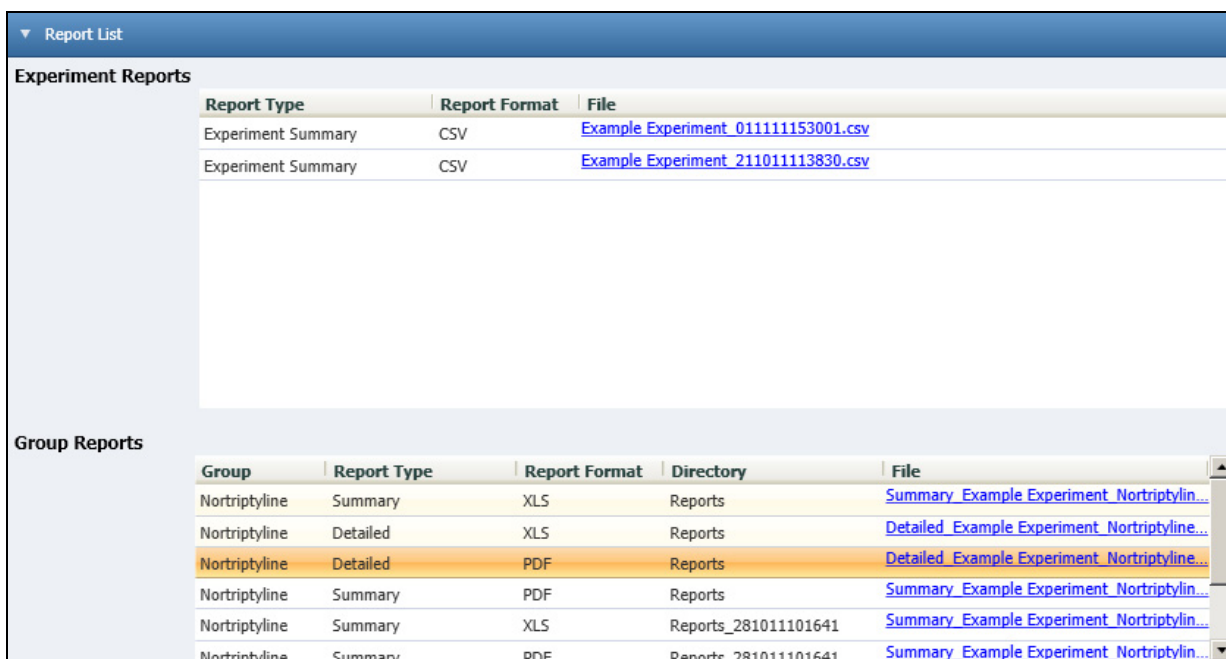
用户可以在 Reports 区域查看为已完成序列生成的报告。若用户选择两种水平，应用程序可以为每个实验提供这两种水平的报告。应用程序还可提供一个可被导入其他数据系统的 CSV 格式文件。还可以查看一个包含实验所有报告链接的页面。

应用程序列出实验的所有报告，提供特定报告的超链接。用户可以利用 Reports 视图访问这些报告。默认情况下，当用户打开 Reports 视图时，应用程序显示 Report List（报告列表）。

- [查看总结报告](#)
- [查看详细报告](#)

❖ 若要查看实验的报告列表

1. 若实验未打开，单击 **Workflows**（**工作流程**）选项卡然后从 Select an Experiment 列表双击实验名称以将其打开。
2. 单击 **Reports** 选项卡以查看可用报告。
3. 在 Reports 视图中，选择一个组名以在 Group Reports（组报告）区域显示来自该组目录的所有报告的列表。列标题为 Group（组）、Report Type（报告类型）、Report Format（报告格式）、Directory（目录）和 File（文件）。



The screenshot shows a software interface titled "Report List". It contains two main sections: "Experiment Reports" and "Group Reports".

Experiment Reports

Report Type	Report Format	File
Experiment Summary	CSV	Example Experiment_01111153001.csv
Experiment Summary	CSV	Example Experiment_21101113830.csv

Group Reports

Group	Report Type	Report Format	Directory	File
Nortriptyline	Summary	XLS	Reports	Summary_Example Experiment_Nortriptylin...
Nortriptyline	Detailed	XLS	Reports	Detailed_Example Experiment_Nortriptyline...
Nortriptyline	Detailed	PDF	Reports	Detailed_Example Experiment_Nortriptyline...
Nortriptyline	Summary	PDF	Reports	Summary_Example Experiment_Nortriptylin...
Nortriptyline	Summary	XLS	Reports_281011101641	Summary_Example Experiment_Nortriptylin...
Nortriptyline	Summary	PDF	Reports_281011101641	Summary_Example Experiment_Nortriptylin...

4. 选择报告名称以在适合该文件类型的应用程序中打开报告。

- 在 Acrobat viewer 中打开 .pdf 文件
- 在 Microsoft Excel 中打开 .xls 文件
- 在 Microsoft Excel 中打开 .csv 文件

有关总结报告视图的更多信息，参阅[查看总结报告](#)。

详细报告包括被几个时间点分割的特定代谢物信息、色谱图以及具有全 MS 扫描质谱的母体药物元素组成的更多信息，还可能包括 MS/MS 或 AIF 扫描质谱图。应用程序稍后在详细报告页上利用每个识别代谢物的质谱图提供元素组成信息。有关详细报告视图的更多信息，参阅[查看详细报告](#)。Data Review 或报告中不包括空白样品。

若要打印报告，参阅第 116 页的“打印报告”。

查看总结报告

总结报告包含以下：

Header（标题）部分	提供组信息及总结和采集设置的总结。
时间过程图	显示母离子药物和代谢的出现和不出现情况。
组分平均（以百分比计）	显示所有时间点相对于母体峰面积的百分比，包括母体药物和所有找到的代谢物。
组分平均（以峰面积计）	显示所有找到的代谢物在所有时间点的峰面积。
内标化合物总结表	若存在内标，显示所有时间点和重复样品的 RSD% 及峰面积。

应用程序按照如下规则在总结报告中显示 NV 单元格和已排除单元格：

- 当排除一个 NV 单元格时，报告中无任何变化。
- 当排除一个在某个时间点具有峰面积值的单元格，且该组分在任意其他时间点都具有峰面积值，应用程序在已排除时间点处将峰面积百分比值显示为空白。
- 当排除一个在某个时间点具有峰面积值的单元格时，应用程序重新计算平均值，并在总结报告中显示平均值。若用户排除强度最大的时间点单元格，应用程序将该重复样品的保留时间改为未排除的次强度时间点。
- 当用户排除某一组分的所有值时或若组分对所有重复样品和 Data Review 中的所有时间点都具有 NV 时，应用程序在所有报告中删除该组分。
- 对于时间点包含所有 NV 的重复样品（行），应用程序在报告中对重复样品显示一个 NV，在表格中显示所有重复样品在每个时间点的平均峰面积和峰面积百分比值，并更改表格标题以指示表格中有平均值。
- 但是，如果所有时间点的所有重复样品均为 NV 或未被排除，应用程序从报告中省略该组分。
- 当用户在 Data Review 中已在总结行中排除了所有时间点（使其为 NV），总结报告表中的时间点也会显示 NV。
- 即使所有值都是 NV，应用程序从不在报告中隐藏列（时间点）。

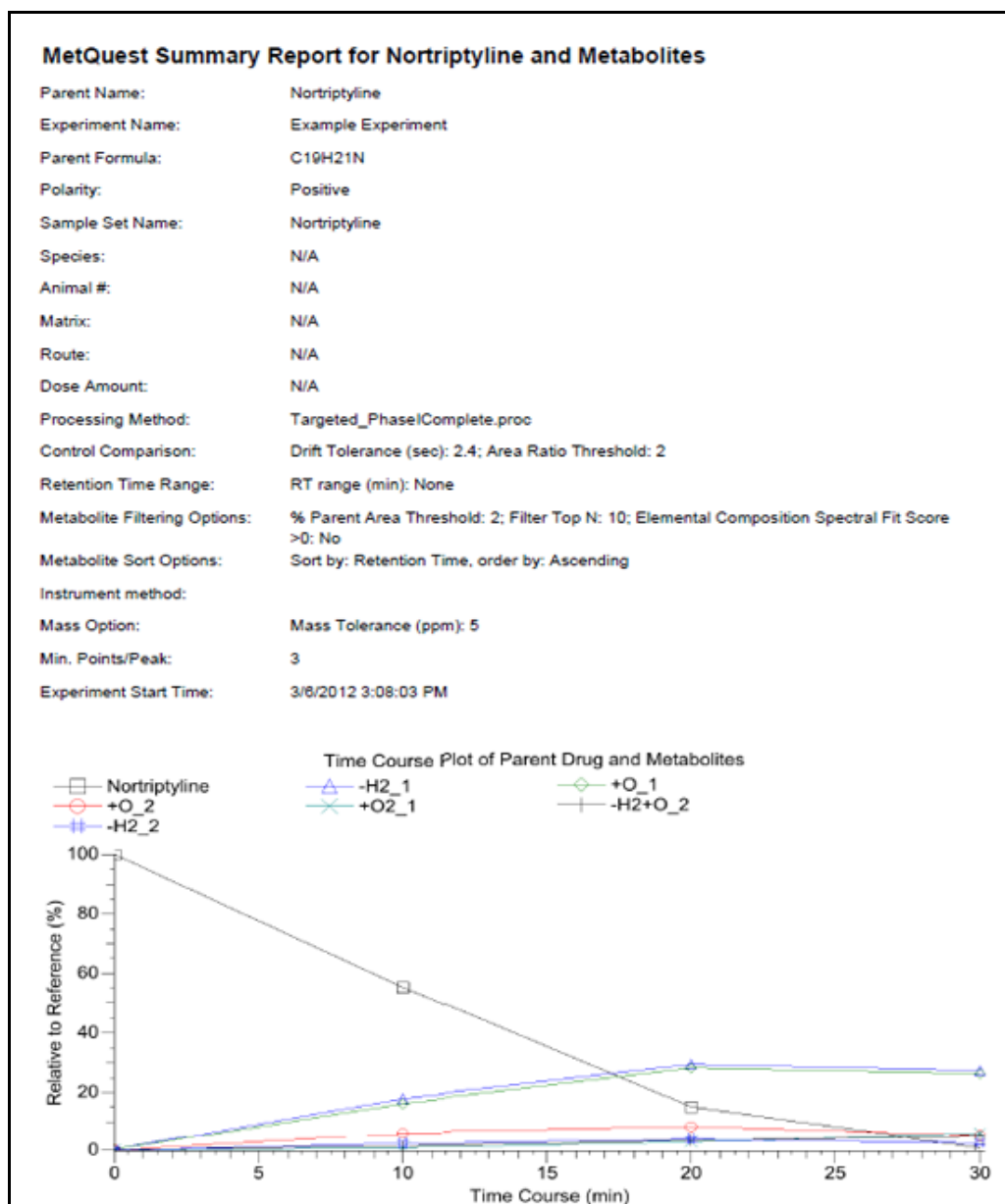
❖ 若要查看总结报告

1. 从左侧的 Groups 列表选择一个组名称。
2. 若要显示组信息，单击 List（列表）区域下拉框中的 **Summary Report**（总结报告）。

– 或 –

单击 Reports List（报告列表）视图中总结报告的链接。

应用程序显示组的总结报告。

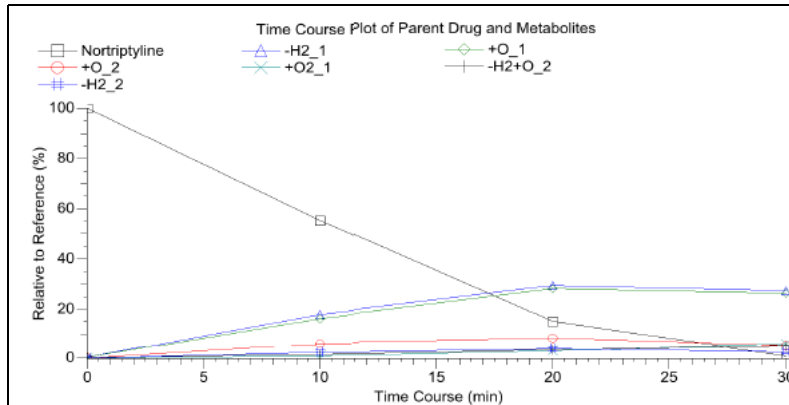


报告包含这些条目：

- 有关组的总结报告，包含采集和处理设置，包括过滤和排序选项。

MetQuest Summary Report for Nortriptyline and Metabolites	
Parent Name:	Nortriptyline
Experiment Name:	Example Experiment
Parent Formula:	C ₁₉ H ₂₁ N
Polarity:	Positive
Sample Set Name:	Nortriptyline
Species:	N/A
Animal #:	N/A
Matrix:	N/A
Route:	N/A
Dose Amount:	N/A
Processing Method:	Targeted_PhaseIComplete.proc
Control Comparison:	Drift Tolerance (sec): 2.4; Area Ratio Threshold: 2
Retention Time Range:	RT range (min): None
Metabolite Filtering Options:	% Parent Area Threshold: 2; Filter Top N: 10; Elemental Composition Spectral Fit Score >0: No
Metabolite Sort Options:	Sort by: Retention Time, order by: Ascending
Instrument method:	
Mass Option:	Mass Tolerance (ppm): 5
Min. Points/Peak:	3
Experiment Start Time:	3/6/2012 3:08:03 PM

- 预期代谢物的时间过程图，显示母体药物和代谢物随时间的量。



在报告的该部分，用户可以查看母体药物的代谢比率及预计代谢物随时间的出现和不出现情况。时间过程图中的代谢物归一化为母体药物（T₀ 处为 100%）。若要指示可能引起样品问题的潜在高丰度杂质，应用程序在 100% 处绘制其与母体药物的关系图（在 T₀ 处）。该图显示母体药物和强度最大的 9 个代谢物。报告不显示内标化合物。

- 包含母体药物和所有已找到代谢物及每个代谢物在每个时间点处的峰面积百分比（在 T0 处相对于母体）的表。该表对查看低水平代谢物的时间过程行为非常有用。若实验具有重复样品，报告显示平均峰面积百分比。

Metabolite Name	RT (min)	Theoretical m/z	Mass Shift	0.0 min	10.0 min	20.0 min	30.0 min
Nortriptyline	2.03	264.1747	0.0000	100.00	55.35	14.75	0.87
+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	0.01	0.96	2.97	5.60
-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	0.60	17.77	29.07	26.84
+O_1	1.76	280.1696	15.9949	0.54	16.07	27.77	25.78
+O_2	1.82	280.1696	15.9949	0.17	5.91	7.91	4.89
-H2_2	1.82	262.1590	-2.0157	0.09	2.50	3.89	2.68
-H2+O_2	1.86	278.1539	13.9793	0.39	1.51	3.38	4.99

- 包含代谢物及每个代谢物在每个时间点处峰面积的表。该表列出母体药物和代谢物随时间过程的峰面积。

Metabolite Name	RT (min)	Theoretical m/z	Mass Shift	0.0 min	10.0 min	20.0 min	30.0 min
Nortriptyline	2.03	264.1747	0.0000	1.8819E9	1.0417E9	2.7757E8	1.6350E7
+O2_1	1.67	296.1645	31.9898	1.9070E5	1.8035E7	5.5831E7	1.0535E8
-H2_1	1.76	262.1590	-2.0157	1.1369E7	3.3446E8	5.4713E8	5.0503E8
+O_1	1.76	280.1696	15.9949	1.0076E7	3.0249E8	5.2266E8	4.8510E8
+O_2	1.82	280.1696	15.9949	3.2676E5	1.1128E8	1.4889E8	9.2054E7
-H2_2	1.82	262.1590	-2.0157	1.6835E5	4.7086E7	7.3206E7	5.0351E7
-H2+O_2	1.86	278.1539	13.9793	7.3614E5	2.8368E7	6.3606E7	9.3823E7

- 包含每次进样的内标峰面积的表（若用户包括内标）。使用该表查看性能，检查样品制备、自动进样器性能和仪器分析，以及所有内标的峰面积响应。

Metabolite Name	Replicate	RSD (%)	0.0 min	6.0 min	16.0 min	30.0 min	46.0 min	80.0 min
Reserpine	1	9.3	1.4693E7	1.6519E7	1.5325E7	1.3027E7	1.1980E7	1.2745E7
Reserpine	2	9.3	1.5380E7	1.5870E7	1.5443E7	1.4489E7	1.5241E7	1.4955E7

查看详细报告

❖ 若要查看详细报告

1. 在 Groups 列表中选择一個组名以显示组信息。
2. 单击 **Detailed Report**（详细报告）。

应用程序显示组的多页详细报告。

MetQuest Detailed Report for Nortriptyline and Metabolites

Parent Name: Nortriptyline
Experiment Name: Example Experiment
Parent Formula: C19H21N
Polarity: Positive
Sample Set Name: Nortriptyline
Species: N/A
Animal #: N/A
Matrix: N/A
Route: N/A
Dose Amount: N/A
Processing Method: Targeted_PhaseIComplete.proc
Control Comparison: Drift Tolerance (sec): 2.4; Area Ratio Threshold: 2
Retention Time Range: RT range (min): None
Metabolite Filtering Options: % Parent Area Threshold: 2; Filter Top N: 10; Elemental Composition Spectral Fit Score >0: No
Metabolite Sort Options: Sort by: Retention Time, order by: Ascending
Instrument method:
Mass Option: Mass Tolerance (ppm): 5
Min. Points/Peak: 3
Experiment Start Time: 3/6/2012 3:08:03 PM

Time 0.0 min.

Compound	Replicate #	RT (min)	Theoretical m/z	Relative to T0 (%)	Area
Nortriptyline	1	2.02	264.1747	90.05	1.6946E9
Nortriptyline	2	2.04	264.1747	109.95	2.0692E9
+O2_1	1	1.67	296.1645	0.01	2.1980E5
+O2_1	2	1.69	296.1645	0.01	1.6161E5
-H2_1	1	1.77	262.1590	0.62	1.1582E7
-H2_1	2	1.79	262.1590	0.59	1.1156E7
+O_1	1	1.77	280.1696	0.55	1.0271E7
+O_1	2	1.79	280.1696	0.53	9.8818E6
+O_2	1	1.83	280.1696	0.17	3.1173E6
+O_2	2	1.85	280.1696	0.18	3.4180E6
-H2_2	1	1.83	262.1590	0.09	1.6820E6
-H2_2	2	1.85	262.1590	0.09	1.6849E6
-H2+O_2	1	1.86	278.1539	0.39	7.2882E6
-H2+O_2	2	1.88	278.1539	0.40	7.4347E6

详细报告包含这些条目：

- Header 部分，显示来自采集和处理工作流程的详细的组总结信息。
- 时间过程中每个时间点的详细表，列出了母体药物和代谢物。该表也包括了所有代谢物及内标（若有一个）的峰面积及相对于母体药物峰面积的峰面积百分比。实际峰面积有助于计算组成比率及半衰期，生成更多绝对定量信息等。

Time 10.0 min.					
Compound	Replicate #	RT (min)	Theoretical m/z	Relative to T0 (%)	Area
Nortriptyline	1	2.02	264.1747	56.76	1.0681E9
Nortriptyline	2	2.02	264.1747	53.95	1.0153E9
+O2_1	1	1.67	296.1645	0.96	1.8034E7
+O2_1	2	1.66	296.1645	0.96	1.8036E7
-H2_1	1	1.77	262.1590	17.77	3.3448E8
-H2_1	2	1.76	262.1590	17.77	3.3444E8
+O_1	1	1.77	280.1696	16.05	3.0210E8
+O_1	2	1.76	280.1696	16.09	3.0289E8
+O_2	1	1.83	280.1696	6.02	1.1338E8
+O_2	2	1.82	280.1696	5.80	1.0918E8
-H2_2	1	1.84	262.1590	2.53	4.7673E7
-H2_2	2	1.83	262.1590	2.47	4.6499E7
-H2+O_2	1	1.87	278.1539	1.50	2.8221E7
-H2+O_2	2	1.86	278.1539	1.52	2.8516E7

Time 20.0 min.					
Compound	Replicate #	RT (min)	Theoretical m/z	Relative to T0 (%)	Area
Nortriptyline	1	2.02	264.1747	14.93	2.8106E8
Nortriptyline	2	2.01	264.1747	14.56	2.7408E8
+O2_1	1	1.66	296.1645	3.04	5.7168E7
+O2_1	2	1.65	296.1645	2.90	5.4494E7
-H2_1	1	1.76	262.1590	29.12	5.4808E8
-H2_1	2	1.76	262.1590	29.02	5.4618E8
+O_1	1	1.77	280.1696	27.98	5.2665E8
+O_1	2	1.76	280.1696	27.56	5.1868E8
+O_2	1	1.83	280.1696	7.84	1.4759E8
+O_2	2	1.82	280.1696	7.98	1.5019E8
-H2_2	1	1.83	262.1590	3.88	7.3110E7
-H2_2	2	1.82	262.1590	3.90	7.3302E7
-H2+O_2	1	1.86	278.1539	3.30	6.2187E7
-H2+O_2	2	1.85	278.1539	3.46	6.5025E7

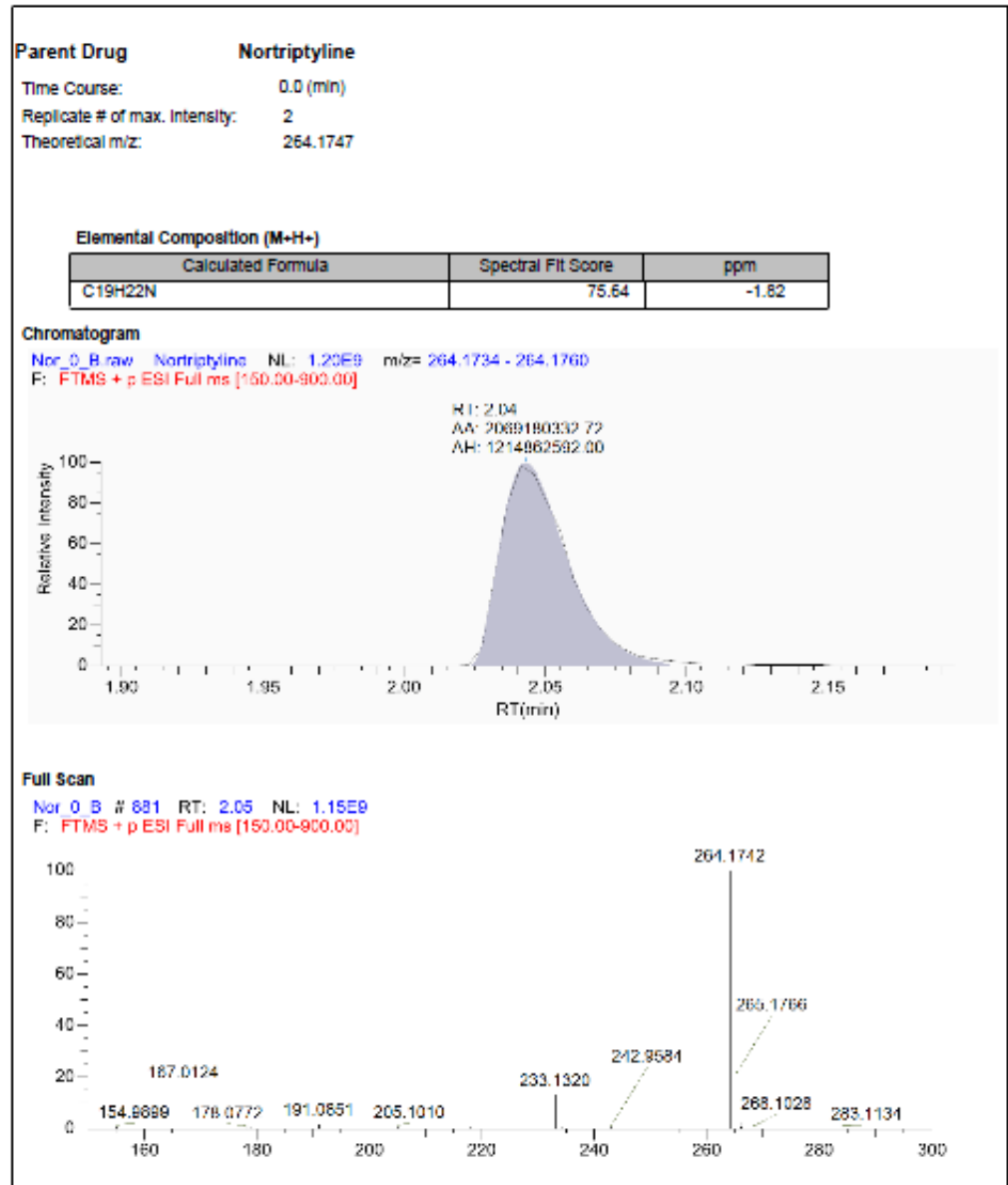
该表显示所有组分的保留时间及理论 m/z 及存在的母体药物量。

Relative to T0%（相对于 T0%）列显示代谢物相对于母体药物量的量（T0 处总是列为 100%）。

下表显示代谢物时间过程中的裂解产物。每个时间过程起始于母体化合物，之后为内标，然后为代谢物（按 RT 升序）。

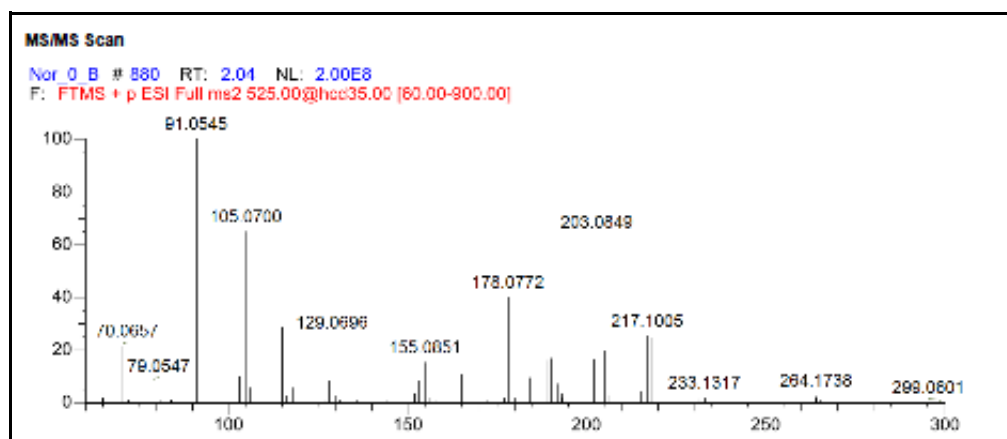
当重复行中的化合物被排除或在某个时间点具有 NV 时，该化合物将会被从详细报告里该重复行的特定时间点处删除。

- 有关所有重复样品间最大强度时间点处化合物的详细信息。它首先显示母体药物，之后为内标（若可用），然后为按保留时间排序的预计代谢物。



信息包括下列内容：

- 名称或代谢物 ID
- 样品的时间点数和重复数及化合物的最大强度峰面积
- 理论 m/z
- 元素组成结果表
 - 计算分子式
 - 谱图拟合分数
 - 百万分之一 (ppm)
- 提取离子色谱图 (XIC)
- 全 MS 扫描质谱图
- MS/MS 扫描或 AIF 扫描 (若可用)



处理实验 CSV 文件

若要生成将结果从单个实验转移至处理工具或数据库的报告，采用 Report Options 区域的 Experiment CSV Export (以 CSV 导出实验) 选项。应用程序将报告命名为 *ExperimentName_YYYYMMDDHHMMSS.csv*，并将其保存至 *experiment_name\Experiment Reports* 文件夹。

可以在采集之前或数据查看之后选择实验 CSV 选项。文件在 Data Review 组分查看表中包含所有数据，报告全精度、样品设置信息及排序和过滤设置。应用程序在详细报告中将所有已排除单元格和 NV 单元格显示为空白。

当所有重复样品所有时间点的峰面积为 NV 或已排除时，应用程序在 CSV 报告中不显示该代谢物。

当某个重复样品在所有时间点的值为 NV 或已被排除，但另一个重复样品具有一个包括值，应用程序在报告中显示所有重复行。当一个已导入的 CSV 文件包含一个被分配了的时间点或重复行的空白栏，应用程序使该列变灰并忽略该时间值或该重复数。

能够在 Excel 电子数据表中打开的、包含已排除或 NV 单元格的报告显示一个空白单元格。

❖ 若要打开实验 CSV 文件

1. 若实验未打开，单击 **Workflows** 选项卡然后从 Select an Experiment 列表选择实验名称以将其打开。
2. 单击 **Reports** 选项卡以查看可用报告。
3. 单击该报告的实验 CSV 标题。

该文件看上去与本示例报告类似。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	Group	Replicate	Component	Formula	Retention	Theoretical	Mass Shift	T0.0 %	T10.0 %	T20.0 %	T30.0 %	T0.0 Area	T10.0 Area	T20.0 Area	T30.0 Area
2	Nortriptyl	Avg	'Nortriptyl'	'C19H21N	2.029923	264.1747	0	100	55.35477	14.74942	0.868795	1.88E+09	1.04E+09	2.78E+08	16349901
3	Nortriptyl	1	'Nortriptyl'	'C19H21N	2.016734	264.1747	0	90.04863	56.75665	14.93471	0.971818	1.69E+09	1.07E+09	2.81E+08	18288685
4	Nortriptyl	2	'Nortriptyl'	'C19H21N	2.043112	264.1747	0	109.9514	53.9529	14.56413	0.765773	2.07E+09	1.02E+09	2.74E+08	14411117
5	Nortriptyl	Avg	'+O2_1	'+O2	1.669757	296.1645	31.98983	0.010134	0.958347	2.966726	5.597898	190703.5	18035171	55830962	1.05E+08
6	Nortriptyl	1	'+O2_1	'+O2	1.668777	296.1645	31.98983	0.01168	0.958286	3.037788	5.798609	219798	18034031	57168277	1.09E+08
7	Nortriptyl	2	'+O2_1	'+O2	1.670737	296.1645	31.98983	0.008588	0.958407	2.895664	5.397187	161609	18036311	54493647	1.02E+08
8	Nortriptyl	Avg	'-H2_1	'-H2	1.76006	262.159	-2.01565	0.604126	17.77246	29.07322	26.83605	11369077	3.34E+08	5.47E+08	5.05E+08
9	Nortriptyl	1	'-H2_1	'-H2	1.764383	262.159	-2.01565	0.615447	17.77363	29.12365	27.1857	11582129	3.34E+08	5.48E+08	5.12E+08
10	Nortriptyl	2	'-H2_1	'-H2	1.755737	262.159	-2.01565	0.592805	17.77129	29.0228	26.48641	11156025	3.34E+08	5.46E+08	4.98E+08
11	Nortriptyl	Avg	'+O_1	'+O	1.760643	280.1696	15.99492	0.535434	16.07369	27.77298	25.77727	10076353	3.02E+08	5.23E+08	4.85E+08
12	Nortriptyl	1	'+O_1	'+O	1.76523	280.1696	15.99492	0.545774	16.05265	27.98475	25.48616	10270944	3.02E+08	5.27E+08	4.8E+08
13	Nortriptyl	2	'+O_1	'+O	1.756057	280.1696	15.99492	0.525094	16.09473	27.56122	26.06838	9881763	3.03E+08	5.19E+08	4.91E+08
14	Nortriptyl	Avg	'+O_2	'+O	1.820355	280.1696	15.99492	0.173633	5.913166	7.911791	4.891536	3267612	1.11E+08	1.49E+08	92054056
15	Nortriptyl	1	'+O_2	'+O	1.825077	280.1696	15.99492	0.165644	6.024942	7.842684	5.135851	3117271	1.13E+08	1.48E+08	96651836

❖ 若要修改实验及重新生成 CSV 文件

1. 如果实验尚未打开，则打开实验。
2. 若要作出修改并重新处理实验，单击 **Experiment Setup** 选项卡。
3. 如有必要，对处理方法进行修改。
4. 单击 **Submit (提交)** 重新处理实验。应用程序在 Data Review 中显示结果。
5. 如有必要，对 Data Review 中的过滤选项作出修改。
6. 若要从已有 Data Review 显示中生成报告，单击 **Generate Reports**。

文件包含提供以下列标题及样品信息。

列标题	定义
Group (组)	组名称。
Replicates (重复)	组内的重复样品数。
Component (组分)	组分名称。
Formula (分子式)	母体药物分子式。
Retention Time (保留时间)	组分峰的最高保留时间。
Theoretical m/z (理论质荷比)	组分的理论质荷比 (m/z)。
Mass Shift (质量数变化)	预计组分相对于母体药物的质量数变化。
Tn % (对于每个时间点)	剩余组分百分比, 在每个时间点处基于母体药物进行归一化 ($n =$ 样品时间)。
Tn Area (对于每个时间点)	在选定时间点处剩余组分面积的整数部分 ($n =$ 样品时间)。
RSD (%) (相对标准偏差, %)	内标平均值的相对标准偏差 (RSD)。该值测量了组内所有进样的内标峰面积的精度。如果内标 RSD% 值很低, 则精确度很高。除内标外, 每列该值均为空白。。应用程序报告值精度为小数点后面一位。
Group Parameters (组参数)	
Species (种类)	每个样品的种类 (例如, 老鼠、人类或狗)。
Matrix (基质)	每个样品的基质类型 (例如, 血液或尿液)。
Animal# (动物编号)	动物编号信息。
Route (途径)	In vitro 或 in vivo。
Dose Amount (剂量)	剂量, 包括单位 (例如 μL)。
Time (时间)	时间点定义。
Replicate (重复)	当存在重复时, 为重复数。
Sample ID (样品识别号)	每个样品的识别号。(该值不会显示在报告中。)。 最大长度: 255 个数字和字母符号。
File Name (文件名)	最初原始文件的唯一的文件名。MetQuest 应用程序将原始文件另存为 <i>RawfileName.raw</i> 。采集需要这个值。每个样品的文件名必须是唯一的。 最大长度: 150 个字符。
Sample Type (样品类型)	根据需要进行选择 Control (控制样品)、Blank (空白样品) 或 Sample (样品)。自动处理需要这个值。应用程序利用控制文件进行背景比较, 扣除控制样品中出现的峰。

列标题	定义
Comment（注释）	输入这些样品的可选注释。该信息不用于处理。 最大长度：255 个字符。
Metabolite Sort Options （代谢物排序选项）	为数据排序所选的选项：Ascending 或 Descending。
Metabolite Filtering Options（代谢物过滤 选项）	为数据显示选择的过滤选项。

打印报告

从 Reports 视图中，可以在报告视图内缩放报告或打印报告。参阅第 28 页的“[设置报告选项](#)”，获取有关设置或修改报告打印选项的信息。

❖ 若要打印报告

1. 显示 Reports 视图的报告。
2. 单击  从默认打印机打印。
3. 单击 **OK**。

配置仪器以便采集

使用 Instrument Setup（仪器设置）视图创建仪器方法处理样品和采集数据。MetQuest 应用程序可以使用 Exactive 或 Q Exactive 仪器采集数据。有关处理 LTQ Orbitrap 系列质谱仪数据的更多信息，参阅第 54 页的“利用 MetQuest 应用程序处理采集数据”。

目录

- 配置仪器
- 使用仪器方法

配置仪器

若要配置仪器以便配合使用 MetQuest 应用程序，向系统添加这些仪器。

在提交批次进行采集和处理后，就无法改变仪器配置，直到应用程序已经完成处理。

若要添加或移除仪器，执行合适的步骤：

- 为系统配置添加硬件设备
- 从系统配置移除硬件设备

为系统配置添加硬件设备

❖ 若要添加硬件设备

1. 若要修改硬件配置，关闭任何打开的 Thermo Scientific 软件应用程序。
2. 选择 **Start (开始) > Programs (程序) > Thermo Foundation n.n > Instrument Configuration (仪器配置)**，此处 *n.n* 为 Thermo Foundation 的版本。

Instrument Configuration 窗口打开。

3. 从 Device Types (设备类型) 列表中选择硬件设备之一，以添加到仪器配置。

在 Available Devices (可用设备) 区域中，Instrument Configuration 窗口将所有可配置设备显示为图标。

4. 单击准备添加的设备图标。

如果看不到想要配置的设备，可能需要安装设备驱动。

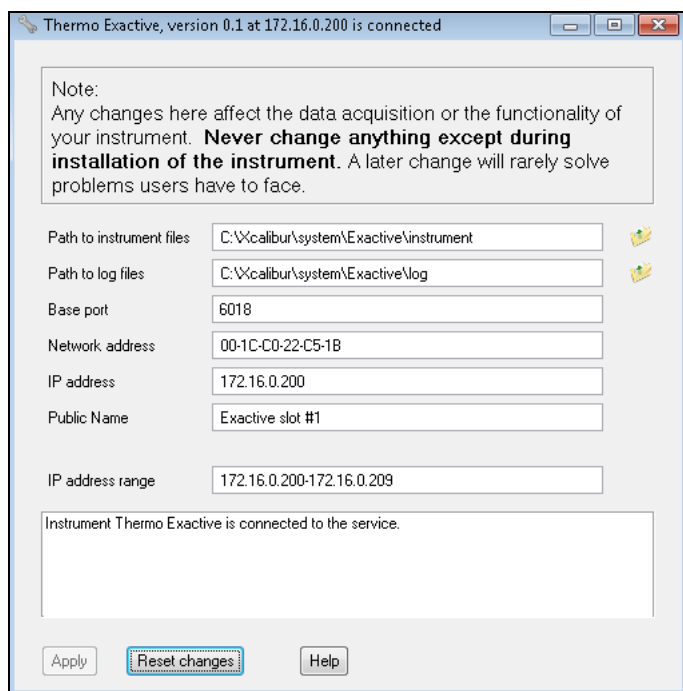
5. 若要将设备添加到 Configured Devices (已配置设备) 区域，单击 **Add (添加)**。

Instrument Configuration 应用程序将选中的 Available Devices 图标复制到 Configured Devices 区域中并将其显示为 Configured Devices 图标。

若要从左列中快速添加设备，双击设备图标。

6. 若要配置设备，从 Configured Devices 区域选中设备图标，然后单击 **Configure (配置)**，或若要快速配置设备，双击右列中的设备图标。

所选设备的配置对话框打开。该对话框用于 Thermo Exactive 仪器。



7. 输入设备所需的所有配置信息。完成所有页面的条目和选项。
每页上的选项会因设备不同而变化。
8. 若要保存设置并关闭 *DeviceName Configuration*（设备名称配置）对话框，单击 **OK（确定）**。
Instrument Configuration 窗口保持打开。
9. 为所有待配置的设备重复步骤 3-8。
10. 若要保存设置并关闭 *Instrument Configuration* 对话框，单击 **Done（完成）**。

一旦已经在系统中添加所有硬件设备，参阅第 121 页的“使用仪器方法”获得更多有关设置仪器方法用于应用程序的信息。

从系统配置移除硬件设备

❖ 若要从系统移除硬件设备

1. 若要使硬件修改生效，关闭所有打开的 Thermo Scientific 应用程序。
2. 选择 **Start > Programs > Thermo Foundation *n.n* > Instrument Configuration**，此处 *n.n* 为 Thermo Foundation 的版本。

Instrument Configuration 窗口打开。

3. 若要从配置中选择待移除的设备，在 Configured Devices 区域中单击设备图标。
4. 单击 **Remove（移除）**。

Instrument Configuration 应用程序从 Configured Devices 区域中移除选中的已配置设备图标。

5. 为所有待移除的设备重复步骤 2-4。
6. 若要保存设置并关闭窗口，单击 **Done**。

使用仪器方法

使用 Instrument Setup 视图定义或修改配置仪器的一系列分析参数。这些参数包括准备使用的仪器操作设置（统称为仪器方法）。

- [创建仪器方法](#)
- [修改仪器方法](#)
- [导入现有仪器方法](#)


创建仪器方法

使用 Instrument Setup 视图定义配置仪器的一系列分析参数。在 Instrument Setup 视图中显示的参数取决于从窗口左侧垂直选项卡栏所选的仪器。如果想要配置的仪器没有显示在这个垂直选项卡栏中，参阅第 117 页的“配置仪器”了解添加仪器的信息。若要查看支持仪器，参阅第 ix 页的“系统要求”。

在应用程序运行实验前后，也可以定义要使用的仪器设置（启动方法和关闭方法）。

- 当因仪器闲置了较长时间而可能影响结果时，定义和使用一个启动方法。启动方法一般执行分析方法包括进样在内的所有功能，但不采集原始文件。因为系统在启动方法过程中进行液体进样，使用空白样浸润或冲洗自动进样器。该空白样并不被处理。
- 当没有立即需要分析的样品，定义和使用一个关闭方法，以确保仪器清洁并可立即进行更多处理。

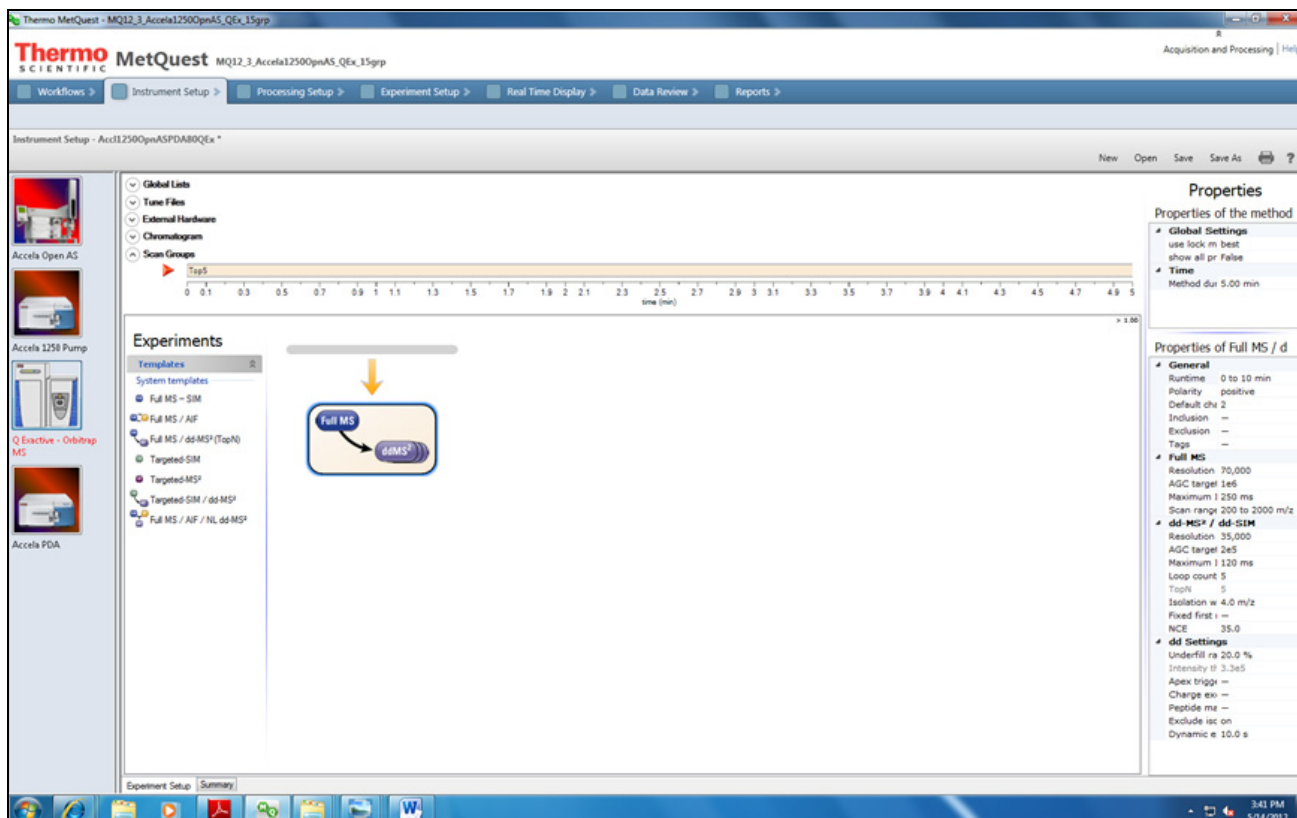
❖ 若要创建仪器方法

1. 双击  打开 MetQuest 应用程序。从 Workflows（工作流程）视图选择一个类型。选择 **Acquisition Only**（仅采集）或 **Acquisition and Processing**（采集和处理）查看、定义或修改仪器方法。
2. 单击 **Instrument Setup** 选项卡打开 Instrument Setup 视图。
3. 从左侧垂直栏单击一个仪器设备标签。

应用程序显示此设备的方法编辑器，并显示仪器方法的 Setup（设置）视图。可以单击 Open（打开）打开已有的仪器方法。

4. 修改仪器参数值。

显示选项与设备的特定要求和功能有关。有关设置参数值，通过转至 **Start**（开始）> **Thermo Instrument**（Thermo 仪器）> **Manuals**（手册）> **LC Devices**（LC 设备），参考如何对特定硬件设备进行设置。



如果想要定义仪器方法的设备不在列表内，确保设备已经添加到系统中。参阅第 117 页的“配置仪器”。

5. 若要设置参数值，在已配置系统上为每个设备重复步骤 2 至 4。当已经在现有仪器内定义参数后，使用下列选项之一保存方法：

- 若要保存对现有方法的修改，单击 Instrument Setup 视图上方的 **Save**（保存）。
- 若要以新名称保存修改的方法，选择 **Save As**（另存为），输入新名称后单击 **Save**。

修改仪器方法

可以在创建仪器方法优化数据采集条件后修改它。在提交实验进行采集和处理后，就无法改变仪器配置，直到应用程序已经完成处理。采集和处理完成后，可以修改仪器设置。

❖ 若要修改仪器方法

1. 在 Instrument Setup 视图中单击 **Open** 打开显示当前仪器方法的浏览框。

应用程序打开默认位置，除非该位置已被修改。假如位置更改，MetQuest 应用程序打开最后定义的位置。

2. 选择现有方法。

Instrument Method 视图显示该方法的当前值。

3. 单击仪器选项卡打开指定仪器的方法页。

4. 修改任意设备的参数值，在 Instrument Setup 视图中单击 **Save Instrument Method**（保存仪器方法）。

应用程序提示保存方法。

如果点击 No（否），选择不保存仪器方法，则应用程序恢复仪器默认值，而不是原始的方法。

导入现有仪器方法

除了创建新方法，还可以导入一个从 MetQuest 应用程序以外创建的现有仪器方法。可以使用具有现有参数设置的方法，或编辑方法。

若要定义使用仪器并选择一个启动仪器，参阅第 30 页的“定义采集参数”。

❖ 若要导入仪器方法

1. 在 Instrument Setup 视图中单击 **Open** 打开浏览框。
2. 选择在另一应用程序中创建的仪器方法（.meth）的名称。

在 MetQuest 应用程序显示方法后，可修改该方法并单击 **Save**。

8 配置仪器以便采集 使用仪器方法

使用模板

MetQuest 应用程序提供样品模板，使数据输入更简单。可以利用 C:\Thermo\MetQuest\ Templates\ 下的模板输入样品信息或预计修饰。若要从 LIM（实验室信息管理）系统导入信息，使用模板中显示的顺序定义列标题。

使用这些步骤创建包含常用信息的模板。

目录

- 利用组和样品信息创建文件
- 使用代谢物修饰列表进行处理

利用组和样品信息创建文件

若要输入一组样品用于采集或处理实验，利用 C:\Thermo\MetQuest\ Templates\ 下的 ImportCSVTemplate.csv 样品模板。若要输入一组重复样品，使用样品模板并根据数字识别重复样品。模板包括下列内容：

group name (组名)	time point (时间点)
processing method (处理方法)	sample type (样品类型)
parent name (母体药物名称)	species (种类)
formula (分子式)	matrix (基质)
sample ID (样品识别号)	dose amount (μL) (剂量, μL)
file name (文件名, 包括 Processing Only (仅处理) 工作流程的完整路径)	animal# (动物编号)
如果相同时间点处组内有重复样品, 重复该数字。	route (途径)
vial position (样品瓶位置)	MOL file path (MOL 文件路径)
Injection Volume (进样体积)	

所有样品必须是某个组的一部分。不要创建一个超过 100 组或 1500 个样品的导入文件。可以每组输入 15 个样品，或者每组包括 1 个控制样品，14 个样品。

❖ 若要创建一个定义多样品采集信息的文件

1. 打开 ImportCSVTemplate.csv 为单个样品或重复样品创建导入文件。

可以在任何类型编辑器（包括 Microsoft Notepad）中打开任意模板。也可以在 Microsoft Excel 中打开一个 .csv 文件更加简便地管理信息。

2. 输入组和样品信息定义采集。

有关有效值的更多信息，参阅第 17 页的“定义组的实验信息”和第 23 页的“手动定义样品信息”。按照如下提示进行操作：

- 当引用一个 .mol 文件时，必须包括一个文件的完整有效路径。
- 当导入 .csv 文件时，应用程序移除当前实验中的所有现有组和样品信息，包括处理方法。为每组添加一个处理方法。应用程序默认的进样体积是 5 μM，除非用户设置一个值。
- 不要在文件名称中加入空格。不要在 Acquisition Only（仅采集）或 Acquisition and Processing（采集和处理）工作流程中包括文件路径。应用程序检查路径名，必须在提交实验进行采集之前移除路径信息。
- 对于处理非 Metquest 文件，输入完整路径，包括 .raw 扩展名。
- 如果选择了 Acquisition Only 或 Acquisition and Processing 工作流程，应用程序忽略样品（如果包含在 .csv 文件中）的文件路径并将处理结果保存在 C:\Thermo\MetQuest\Experiments\experiment_name 组文件名的下面。每个组文件夹包括一个采集数据文件夹和一个报告文件夹。
- 如果选择 Processing Only 工作流程，必须包括每个样品的完整有效路径，将处理结果保存在 C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Groups\ 组文件名下。

- 使用第一次记录的定义，应用程序替换列组中剩余记录的组信息，包括 Group Name、Parent Name、Formula、Species、Matrix、Dose Amount (µL)、Animal# 和 Route。
- 如果提供样品瓶位置不准确，当提交样品时应用程序显示一个错误信息。有关自动进样器样品瓶或板位置格式信息，参阅自动进样器文档。
- 实验中的所有样品必须使用同一组内的时间点。
- 当实验中使用组内的重复样品时，提供一个重复样品编号以便识别。每个重复系列（每行）可以在时间 T0 处具有自己的控制样品。首个重复系列必须以重复数 1 开始。即使用户删除一个重复系列，重复数必须连续。

在填充信息后，文件类似下列格式：

Group Name	Processing Method	Parent Name	Formula	Sample ID	Filename (incl. path)	Replicate	Vial Position	Injection Volume (µL)	Time Point (min)	Sample Type	Species	Matrix	Dose Amount (µM)
Nortriptyline	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Targeted_PhaseIComplete.proc	Nortriptyline	C19H21N	T1	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_0_A.raw	1		5	0	Control	N/A	N/A	N/A
				T4	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_10_A.raw	1		5	10	Sample			
				T7	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_20_A.raw	1		5	20	Sample			
				T11	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_30_B.raw	1		5	30	Sample			

对于包含重复样品的实验，在填充信息后，文件类似下列格式：

Group Name	Processing Method	Parent Name	Formula	Sample ID	Filename (incl. path)	Replicate	Vial Position	Injection Volume (µL)	Time Point (min)	Sample Type	Species	Matrix	Dose Amount (µM)
Nortriptyline	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Targeted_PhaseIComplete.proc	Nortriptyline	C19H21N	T1	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_0_A.raw	1		5	0	Control	N/A	N/A	N/A
				T2	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_0_B.raw	2		5	0	Control			
				T4	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_10_A.raw	1		5	10	Sample			
				T5	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_10_B.raw	2		5	10	Sample			
				T7	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_20_A.raw	1		5	20	Sample			
				T8	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Nortriptyline\Acquired\Nor_20_B.raw	2		5	20	Sample			

3. 单击 **Save As**（另存为）为文件提供一个唯一名称，将其保存在为项目文件夹下的 .csv 文件。参阅 Excel 文档，获取有关将文件另存为 .csv 文件的说明。

9 使用模板

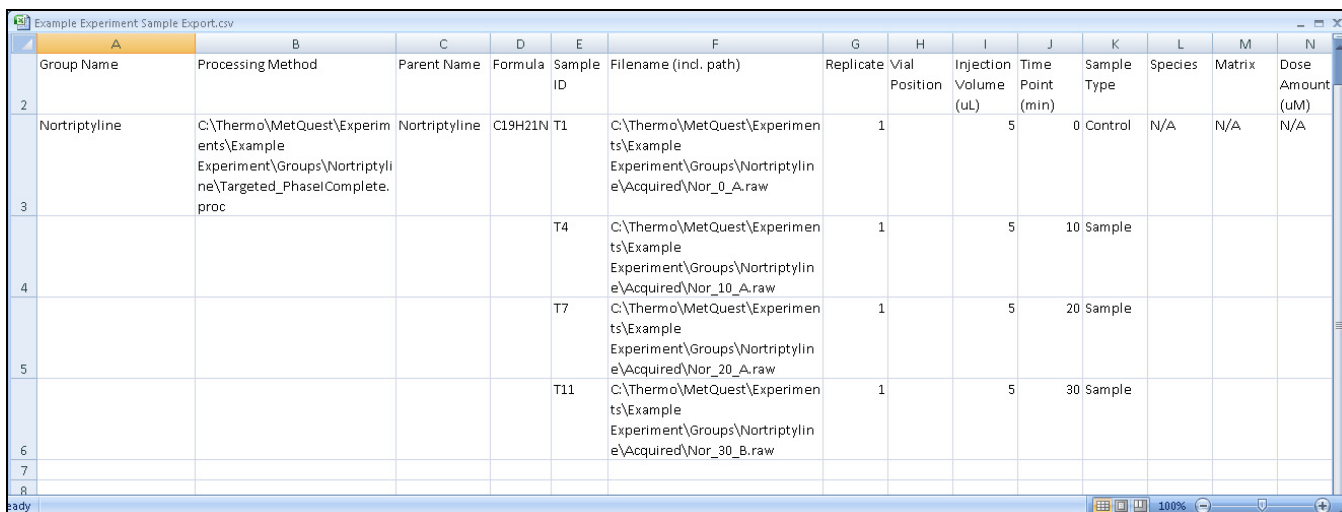
利用组和样品信息创建文件

若要使用这个样品列表，参阅第 32 页的“提交和查看实验”。如果导入文件，应用程序移除所有当前显示组和样品信息，并提示用户以唯一名称保存序列。

❖ 若要导出 .csv 文件以用于新实验

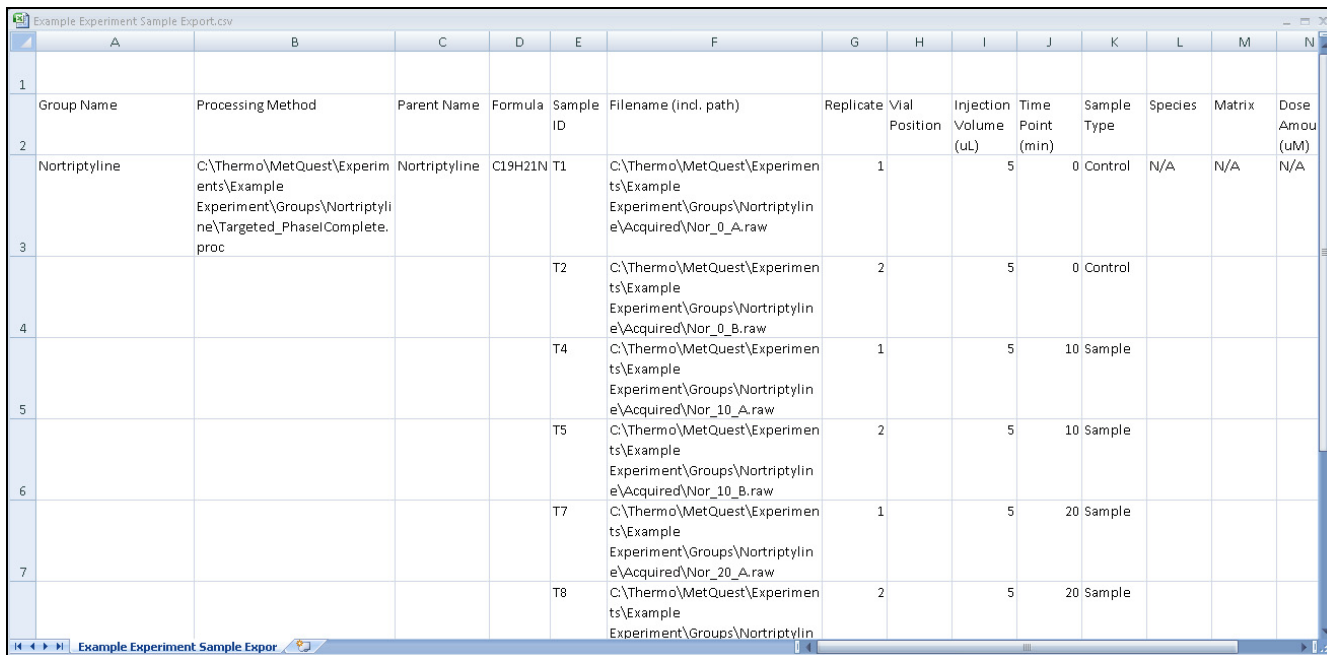
1. 在 Experiment Setup（实验设置）视图中，点击 **Export（导出）**。
2. 为文件命名，并将其保存至某一位置。
3. 为新实验作出修改。
4. 保存文件。

在填充信息后，文件类似下列格式：



Group Name	Processing Method	Parent Name	Formula	Sample ID	Filename (incl. path)	Replicate	Vial Position	Injection Volume (uL)	Time Point (min)	Sample Type	Species	Matrix	Dose Amount (uM)
Norriptyline	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Targeted_Phase1Complete.proc	Norriptyline	C19H21N	T1	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_0_A.raw	1		5	0	Control	N/A	N/A	N/A
				T4	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_10_A.raw	1		5	10	Sample			
				T7	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_20_A.raw	1		5	20	Sample			
				T11	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_30_B.raw	1		5	30	Sample			

对于包含重复样品的实验，在填充信息后，文件类似下列格式：



Group Name	Processing Method	Parent Name	Formula	Sample ID	Filename (incl. path)	Replicate	Vial Position	Injection Volume (uL)	Time Point (min)	Sample Type	Species	Matrix	Dose Amount (uM)
Norriptyline	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Targeted_Phase1Complete.proc	Norriptyline	C19H21N	T1	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_0_A.raw	1		5	0	Control	N/A	N/A	N/A
				T2	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_0_B.raw	2		5	0	Control			
				T4	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_10_A.raw	1		5	10	Sample			
				T5	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_10_B.raw	2		5	10	Sample			
				T7	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_20_A.raw	1		5	20	Sample			
				T8	C:\Thermo\MetQuest\Experiments\Example Experiment\Groups\Norriptyline\Acquired\Nor_20_B.raw	2		5	20	Sample			

5. 打开新实验。
6. 将已修改文件导进 Sample Setup（样品设置）。

使用代谢物修饰列表进行处理

可以使用由 MetQuest 应用程序提供的修饰列表之一，或修改列表并将其保存为不同的名称。若要填充预期代谢物列表，使用 .csv 文件以包含信息。一旦创建一个文件，就可以将其导入处理方法。

- Phase I（第一阶段）修饰包括氧化、还原和水解反应。
- Phase II（第二阶段）修饰包括共轭反应，例如葡萄糖苷酸共轭。

❖ 若要打开修饰列表

1. 在应用程序中单击 **Processing Setup**（处理设置）选项卡并单击 **Metabolite Options**（代谢物选项）。
2. 在 Expected Metabolites（预计代谢物）区域中单击 **Import**（导入）并浏览至其中一个代谢物修饰列表。选择列表名并单击 **OK**（确定）。

从五个工厂提供的修饰列表中选择，路径为 C:\Thermo\MetQuest\Templates\ 目录。

默认：MetQuest_PhaseI_Common.csv（使用这个列表，除非用户选择另一个。）

- MetQuest_PhaseI_Common.csv
- MetQuest_PhaseI_Complete.csv
- MetQuest_PhaseI+II_Common.csv
- MetQuest_PhaseII_Common.csv
- MetQuest_PhaseII_Complete.csv

❖ 若要修改列表

1. 在 Excel 应用程序或文本编辑器中打开修饰列表模板文件之一。

若用户在文本编辑器中作为 .txt 文件打开文件时，用户无需改变文件的格式。如果导入 .xls 格式的报告，用户必须修改文件中分子式的格式以便导入。

	A	B	C	D
1	Modification	Formula	Mass Shift	Defect
2	debutylation	-C4-H8	-56.0626	-62.6
3	debutylation + hydrogenation	-C4-H6	-54.0469	-46.9
4	deacetylation + desaturation	-C2-H4-O	-44.0262	-26.2
5	depropylation	-C3-H6	-42.047	-47
6	deacetylation	-C2-H2-O	-42.0106	-10.6
7	nitro-reduction	+H2-O2	-29.9742	25.8
8	2x demethylation	-C2-H4	-28.0313	-31.3
9	hydroxylation + deacetylation	-C2-H2	-26.0157	-15.6
10	demethylation + desaturation	-C-H4	-16.0313	-31.3
11	reduction	-O	-15.9949	5.1
12	demethylation	-C-H2	-14.0157	-15.7
13	hetero oxide reduction + hydrogenation	+H2-O	-13.9793	20.7
14	hydroxylation + 2x demethylation	-C2-H4+O	-12.0364	-36.4
15	demethylation + hydrogenation	-C	-12	0
16	desaturation	-H2	-2.0157	-15.7
17	demethylation + methylene to ketone	-C-H4+O	-0.0364	-36.4
18	oxidative deamination to alcohol	-N-H+O	0.984	-16
19	hydroxylation + demethylation	-C-H2+O	1.9793	-20.7
20	hydrogenation	+H2	2.0157	15.7

2. 若要将文件导入至 Excel 电子数据表，执行以下操作：
 - a. 在 Excel 应用程序中打开一个空白工作表。
 - b. 单击 **Data (数据)** 选项卡，然后单击 **Get External Data (获取外部数据)**。
 - c. 单击 **From Text (来自文本)** 以显示浏览窗口。
 - d. 浏览至 C:\Thermo\MetQuest\Templates 文件夹。
 - e. 选择 ImportModificationListTemplate.csv 文件。
 - f. 单击 **Import**。
 - g. 选择 **Delimited (确定界限)** 选项并单击 **Next (下一步)**。
 - h. 选择 **Comma (逗号)** 分隔符并单击 **Next**。
 - i. 选择 **Formula (分子式)** 列。
 - j. 将列数据格式更改为 **Text (文本)**，然后单击 **Finish (完成)**。
3. 添加代谢物，识别下列值：
 - Modification (修饰)
 - Formula (分子式)
 - Mass Shift (质量数变化)
4. 将列表导入 MetQuest 应用程序之前，将它保存为不同的名称。

翻译术语表

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

符号

% Parent Area 母体峰面积百分比
% Parent Area Threshold 母体峰面积百分比阈值
% Remaining 剩余百分比
%Area 峰面积百分比
%Parent 母体药物百分比
%RSD 相对标准偏差百分比
.SLD Sample List .SLD 样品列表

A

About MetQuest 关于 MetQuest
Acquisition 采集
Acquisition and Processing 采集和处理
Acquisition Only 仅采集
Acquisition Parameters 采集参数
Acquisition Queue 采集队列
Activate Later 以后激活
Activate Now 马上激活
Add 添加
Add Row 添加行
Advanced Spectral Fit Parameters 高级谱图拟合参数
All Ions Fragmentation/AIF 所有离子裂解
All Programs 所有程序

Animal#/Animal 动物编号

Apply 应用

Area 峰面积

As Configured 如配置

Ascending 升序

Autosampler 自动进样器

Available Devices 可用设备

Average 平均值

B

Blank 空白样品

C

Cancel 取消

Comma 逗号

Comment 注释

Communicator 通信

Component 组分

Component Review 组分查看

Configuration Options 配置选项

Configuration Setup 配置设置

Configure 配置

Configured Devices 已配置设备

Continue Experiment 继续实验

Control 控制样品

Control Subtraction 控制扣除

Copy 复制

Copy Down 向下复制

Copy to Clipboard 复制到剪贴板

Customer Manuals 用户手册

Cut 剪切

D

Data 数据

Data Display 数据显示

Data Review 数据查看

Delete/DELETE 删除

Delimited 确定界限

Descending 降序

Detail 详细

Detailed Report 详细报告

Device Types 设备类型

DeviceName Configuration 设备名称配置

Directory 目录

Do Not Use 不使用

Done 完成

Dose Amount 剂量

Drift Tolerance (sec) +/- 漂移容许偏差 (sec) +/-

E

Element 元素

Elemental Composition 元素组成

Elemental Composition Limits 元素组成限值

Elemental Composition Review 元素组成查看

Elemental Composition Spectral Fit Score > 0 元素组成谱图拟合分数大于 0

Elements in Use 所用元素

Enter 回车

Even Electrons 偶电子

Example Experiment 示例实验

Exclude All Components From Injection 从进样排除所有组分

Exclude All Components From Replicate 从重复样品排除所有组分

Exclude Component From Injection 从进样排除组分

Exclude Component From Replicate 从重复样品排除组分

Exclude Time Point From All Groups 从所有组中排除时间点

Exclude Time Point From Group 从组中排除时间点

Excluded 已排除

Expected Intensity Error (%) 预计强度误差 (%)

Expected Mass Error (ppm) 预计质量数误差 (ppm)

Expected Metabolites 预计代谢物

Experiment CSV Export/Experiment .csv Export 以 CSV 导出实验

Experiment Log 实验日志

Experiment Reports 实验报告

Experiment Setup 实验设置

Export 导出

Extracted Ion Chromatogram/XIC 提取离子色谱图

F

Feature Info 特征信息

File 文件

File Name 文件名

Fill Down 向下填充

Filter and Sort 过滤和排序

翻译术语 : Filtering and Sorting Options

Filtering and Sorting Options 过滤和排序选项

Filtering Options 过滤选项

Finish 完成

Fit Factor 拟合因子

Formula 分子式

From Text 来自文本

Full MS Scan 全 MS 扫描

G

Generate Reports 生成报告

Get External Data 获取外部数据

Go 前进

Group Name 组名

Group Parameters 组参数

Group Reports 组报告

Group(s) 组

H

Header 标题

Help 帮助

I

Import 导入

Import Validation 导入确认

In Vitro 体外

In Vivo 体内

Include Adducts 包括加合物

Include All Components From Injection 从进样包括所有组分

Include All Components From Replicate 从重复样品包括所有组分

Include Component From Injection 从进样包括组分

Include Component From Replicate 从重复样品包括组分

Include Time Point From All Groups 从所有组中包括时间点

Include Time Point From Group 从组中包括时间点

Inj. Volume/Injection Volume 进样体积

Instrument Configuration 仪器配置

Instrument Method 仪器方法

Instrument Setup 仪器设置

Instruments in Use 所用仪器

Intensity 强度

IS 内标

IS_Formula 内标分子式

IS_MW 内标分子量

ISTD/Elemental Comp 内标 / 元素组成

L

Laboratory Information Management/LIM 实验室信息管理

LC Devices LC 设备

License 许可证

List 列表

M

m/z 质荷比

m/z value 质荷比值

M+H⁺ (m/z) 质子化 (质荷比)

Manuals 手册

Mass 质量数

Mass Difference 质量数差值

Mass Option 质量数选项

Mass Shift 质量数变化

Mass Shift From Parent 相对母体的质量数变化

Mass Tolerance (ppm) 质量数容许偏差 (ppm)

Matrix 基质

Max Results 最大结果数

Maximum 最大值

Metabolite Filtering Options 代谢物过滤选项

Metabolite Options 代谢物选项

Metabolite Sort Options 代谢物排序选项

Method(s) 方法

MetQuest Help MetQuest 帮助

MetQuest License MetQuest 许可证

MetQuest Quick Start Guide MetQuest 快速入门手册

MetQuest User Guide MetQuest 用户手册

M-H- (m/z) 去质子化 (质荷比)

Min. # of Points Across a Peak 峰定义的最小点数

Minimum 最小值

Modification 修饰

Mol File Mol 文件

Mol File Path MOL 文件路径

Most Intense (%) 最大强度 (%)

MW/Molecular Weight 分子量

N

Name/ID 名称 / 识别号

New Experiment 新实验

Next 下一步

Nitrogen Rule 氮规则

No 否

Nominal Mass 名义质量

O

Odd Electrons 奇电子

Off 关机

OK 确定

On 开机

Open 打开

Open Method 打开方法

P

Parent Name 母体药物名称

Paste 粘贴

Paste Above 上方粘贴

Paste Below 下方粘贴

Perform Data Review 执行数据查看

Phase I 第一阶段

Phase II 第二阶段

Polarity 极性

Position 位置

Proc. Method/Processing Method 处理方法

Processing 处理

Processing Display 处理显示

Processing Failed 处理失败

Processing Log 处理日志

Processing Method 处理方法

Processing Only 仅处理

Processing Setup 处理设置

Processing Status 处理状态

Processing Status Display 处理状态显示

Programs 程序

R

RDB Equiv High 环双键当量高值

RDB Equiv Low 环双键当量低值

Real Time Acquisition 实时采集

Real Time Acquisition Display 实时采集显示

Real Time Display 实时显示

翻译术语 : Real Time Processing Display

Real Time Processing Display 实时处理显示

Realtime 实时

Relative Quan/Qual 相对定量 / 定性

Relative to T0% 相对于 T0%

Remove 移除

Rename 重命名

Replicate Number 重复数

Replicate(s) 重复

Report Format 报告格式

Report List 报告列表

Report Options 报告选项

Report Type 报告类型

Report(s) 报告

Reports Options 报告选项

Reports View 报告视图

Reset Scaling 重置缩放比例

Resource Library 资源库

Retention Time Range 保留时间范围

Return/RETURN 返回

Review 查看

Route 途径

RT (min) Low 保留时间 (分钟) 低

RT (min) 保留时间 (分钟)

RT/Retention Time 保留时间

S

Sample 样品

Sample ID 样品识别号

Sample Info/Sample Information 样品信息

Sample Setup 样品设置

Sample Type 样品类型

Samples 样品

Save 保存

Save As 另存为

Save Instrument Method 保存仪器方法

Select an Experiment 选择实验

Set 设置

Setup 设置

Show Spectrum Trace 显示质谱图

Shutdown 关闭

Sorting Options 排序选项

Source 来源

Species 种类

Spectral Fit 谱图拟合

Standby 待机

Start 开始

Start Instrument 启动仪器

Start/Stop/Pause 启动 / 停止 / 暂停

Startup 启动

Status 状态

Submit 提交

Sum Area Option 总面积选项

Summary 总结

Summary Report 总结报告

System Power Scheme 系统电源管理

T

Template 模板

Text 文本

Theoretical m/z 理论质荷比

Thermo Instrument Thermo 仪器

Time 时间

Time Course 时间过程

翻译术语表 : Time Point

Time Point 时间点

Top N Components 前 N 个组分

Tray Name 托盘名称

U

Use Automatic Integration 使用自动积分

Use Intelligent Elemental Calculations 使用智能
元素计算

Use Manual Peak Integration 使用手动峰积分

V

Vial Position 样品瓶位置

View Elements 查看元素

View File 查看文件

View Mol File 查看 Mol 文件

W

Workflows 工作流程

Y

Yes 是

索引

符号

- .mol 文件
 - 内标 45
- %Parent Area Threshold, 设置 42

英文字母

- Acquisition and Processing 工作流程 3
- Acquisition Only 工作流程 3
- Component Review, 图像 75
- Control Comparison
 - Drift Tolerance 39
- Control Subtraction
 - Intensity Ratio Threshold 41
- Data Review
 - Component Review 区域 75
 - Elemental Composition 结果, 查看 86
 - MS/MS 扫描 85
 - 保存修改 102
 - 查看实验 74
 - 查看重复样品结果 79
 - 从所有组中排除
 - 时间点 96
 - 当排除重复样品时重新计算 98
 - 定义报告选项 102
 - 对组分进行排序 91
 - 改变组分 90, 93
 - 积分组分, 介绍 101
 - 排除
 - 单个样品 94
 - 时间点 95
 - 时间过程 97
 - 重复样品 98, 100
 - 全扫描显示 88
 - 时间过程图 82
 - 手动积分组分 101
 - 提取离子色谱图 (XIC) 83
 - 修改色谱图 83
 - 选择组分 77
 - 元素组成表 87
 - 元素组成结果 87

- 组分表
 - 参数 78
 - 计算平均值 80
 - 使用箭头键 81
- Drift Tolerance, 设置值 39
- Elemental Composition 区域
 - Max Results 48
 - Nitrogen Rule 47
 - 电荷态 47
 - 环双键当量值 48
 - 质量数容许偏差 31, 47
- Expected Intensity error (%), Spectral Fit 区域 50
- Filtering and Sorting Options 窗口 90
- ImportModificationListTemplate.csv, 使用 43
- Instruments in Use 30
- Intensity Ratio Threshold
 - 包括峰 41
 - 值 41
- ISTD
 - 使用 38
- Mol 文件
 - 母体药物 18
- Nitrogen Rule 47
- PDF 报告, 选择 28
- Processing Only 工作流程
 - 定义 3
 - 利用 MetQuest 处理采集数据 54
- Processing Setup, 进入 39
- Real Time Acquisition Display
 - 采集队列 65
 - 查看处理状态 70
 - 查看日志 70
 - 查看仪器状态 64
 - 错误管理 71
 - 打开区域 67
 - 设备状态 65
 - 说明 63, 66-67
 - 停止处理 69
 - 状态信息 65
- Sample Setup 视图 15
- Sample Setup 视图 6
- Select an Experiment 列表, 使用 54, 56

Spectral Fit 区域, Expected Intensity error (%) 50
 Sum Area Option (添加加合物) 46
 XLS 报告, 选择 28

B

保存修改, Data Review 102
 保留时间窗口 39
 报告
 保存 116
 打印 116
 介绍 104
 选项
 Data Review 102
 Report Options 区域 28

C

采集
 定义序列 13
 队列, 移除样品 66
 采集数据 55
 采集数据, 处理 54
 查看
 实验日志 103
 查看方法 52
 处理
 .sld 文件中的数据 59
 采集数据 54
 查看保存日志 70
 查看日志 70
 管理错误 71
 利用 MetQuest 处理采集数据 54
 配置文件, 设置参数 52
 停止处理 69
 已采集的数据 54
 处理方法
 创建 38
 使用 37
 用于已采集的数据 54, 59
 找到代谢物 38
 处理已采集的数据 55
 创建
 处理方法 38
 模板 126
 从模板导入文件
 126
 从实验
 中排除时间点 96
 从组分表选择组分 77

D

打印报告 116
 代谢物
 过滤 42
 列表 38
 找到 38

导入
 仪器方法 123
 调查链接 xii
 定义
 母体药物信息 16
 内标 45
 实验信息 13
 元素组成值 45
 组信息 16
 动物编号, 组信息 19

F

方法
 查看 52
 修改 52
 分子量 (MW), 组信息 19
 分子式
 母体药物 8, 18
 内标 45
 丰度
 强度误差加权 50
 质量数误差加权 50

G

工作流程
 Acquisition and Processing 3
 Acquisition Only 3
 Processing Only 3
 关闭方法, 定义 121
 过滤代谢物 42

H

环 48–49
 获得许可证 x

J

积分组分 101
 基质, 组信息 19
 极性
 内标 45
 组信息 19, 45
 计算组分表内平均值 80
 剂量, 组信息 19

K

控制文件, 使用 38

L

理论 m/z 范围, 设置 42
 联系我们 xii
 列表, 预计代谢物 43, 129

M

- 名称, 组信息 19
- 模板, 类型 126
- 母体药物
 - Mol 文件 7, 18, 45
 - 定义处理 17
 - 分子式 8, 18
- 内标
 - .mol 文件 45
 - MW 45
 - 定义 45
 - 分子量 45
 - 分子式 45
 - 极性 45
 - 名称 45
 - 用于处理 45
 - 源 45

P

- 排除
 - 在 Data Review 中排除重复样品 98, 100
 - 在 Data Review 中排除时间过程 97
- 排除重复样品 100
- 配置
 - 多仪器 122
 - 硬件设备 118

Q

- 启动方法, 定义 121
- 全扫描显示
 - 缩放 88
 - 在 Data Review 中 88

S

- 色谱图
 - Reset Scaling 84
 - 在 Data Review 区域修改 83
- 删除组 17
- 时间点
 - 从所有组中排除 96
 - 在 Data Review 中排除 95
- 时间过程, 在 Data Review 中排除 97
- 时间过程图, Data Review 82
- 实验
 - 导出 59
 - 导入 59
 - 定义 13
- 实验日志, 在 MetQuest 内查看 103
- 双键 49
- 双键当量值 48–49

T

- 提取离子色谱图 (XIC), 在 Data Review 中 83
- 添加
 - 仪器到 MetQuest 117
 - 硬件设备 118
 - 组 16
- 途径, 组信息 19

W

- 文档调查 xii

X

- 相对定量, 计算 44
- 详细报告
 - 查看 110
 - 目录 111
- 详细信息
 - 母体药物信息 112
- 修改
 - Data Review 区域的色谱图 83
 - 处理方法 52
 - 仪器方法 123
 - 组信息 17
- 修改修饰列表 129
- 修饰列表
 - 打开 129
 - 预计代谢物列表 43
- 许可证, 获得 x

Y

- 样品
 - 定义实验信息 13
 - 定义组信息 16
 - 实时样品采集信息 65
 - 实时样品处理信息 70
 - 使用导入文件定义信息 26
 - 在 Data Review 中排除 94
 - 在样品表中定义信息 23
- 仪器
 - 配置多仪器 122
 - 添加到 MetQuest 117
 - 选择 (Instruments in Use) 30
 - 选择启动仪器 29
- 仪器方法
 - Instrument Setup 窗口概述 121
 - 创建 121
 - 导入 123
 - 定义 121
 - 修改 123
 - 选择进行采集 29
- 仪器状态
 - 采集队列 65
 - 查看 64

- 复制 64
- 改变比例 64
- 设备状态 65
- 硬件设备, 添加和配置 118
- 预计代谢物列表
 - 编辑 130
 - 使用 43
- 元素组成, Data Review 结果 87

Z

- 在 Data Review 区域查看实验 74
- 在 Data Review 中的 MS/MS 扫描 85
- 在 Data Review 中对元素进行排序
 - m/z 值 91
 - 保留时间 91
 - 强度 91
 - 质量数变化 91
- 在 Data Review 中过滤组分
 - % Parent Area Threshold 90
 - Elemental Composition Spectral Fit Score > 0 90
 - Top N Components 90
- 在 Data Review 中改变组分 93
- 找到组 17
- 质量数容许偏差 31, 47
- 质谱处理, 指定值 44
- 种类, 组信息 19
- 重复实验, 组分表 76
- 重复样品
 - 查看结果 79
 - 当排除时重新计算 98
 - 定义 24
 - 在 Data Review 中排除 98
- 重新处理数据 55
- 重新命名组 17
- 总结报告
 - 查看 107
 - 出现 / 不出现图 108
 - 目录 108
- 组
 - 定义母体药物 17
 - 删除 17
 - 添加 16
 - 修改信息 17
 - 找到 17
 - 重新命名 17
- 组分
 - 手动积分 101
 - 在 Data Review 中积分 101
- 组分表
 - Data Review
 - 参数 78
 - 使用箭头键 81
 - 选择组分 77
 - 计算平均值 80

- 组分表内的箭头键, 使用 81
- 组信息
 - 动物编号 19
 - 分子量 (MW) 19
 - 基质 19
 - 极性 19, 45
 - 剂量 19
 - 来源 19
 - 名称 19
 - 途径 19
 - 种类 19
- 最大结果数 48
- 最佳拟合分数, 设置 42