

MassHunter 定性面积汇总

黄河

(四川省化工质量安全检测研究院, 四川 成都 610031)

摘要: 利用 excel 模板对 MassHunter 定性功能中每个峰的面积汇总。

关键词: MassHunter;面积汇总

1 发现问题

使用 MassHunter 定性软件, 通过积分色谱图后, 会得到所需各个峰的峰面积, 使用自定义 PDF 报告模板打印报告时, 可以显示每个峰的面积。但如果想汇总计算这些峰的总面积, 就不行了, 原始模板没这个功能。

2 解决问题

此时使用 excel 模板, 通过编辑模板则可以实现此功能。先开始摸瓜, 要找到模板所在位置。在 MH 软件中设置“方法自动处理/报告/模板”为使用 Microsoft Excel, 然后在下方的自定义里选中“AnalysisReport.xlsx”, 如图 1。

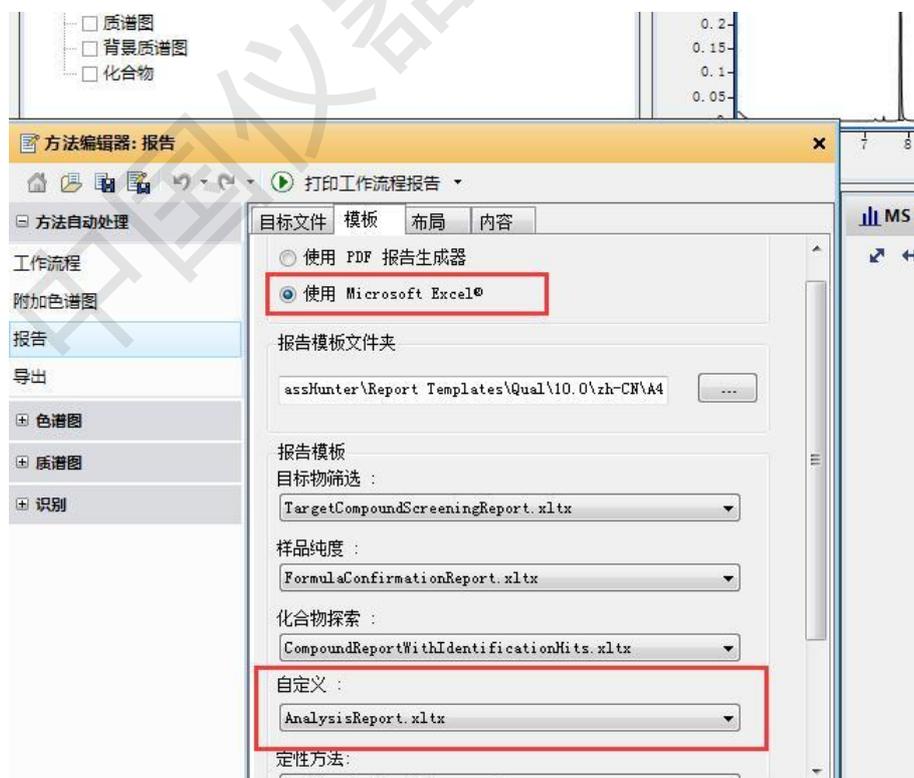


图 1

此时打印出来的报告是只有单一峰面积的。如图 2。

注意此时这个模板的路径为“D:\MassHunter\Report Templates\Qual\10.0\zh-CN\A4”，那就顺着这个路径摸瓜。

直接用 excel 打开“AnalysisReport.xlsx”，通过与生成的报告想比较，得知行 19，行 20 就是报告中显示峰结果标题和峰结果的。那就在这行 19 的最后一列新增一列，命名为总面积。报告中有单一峰的峰面积，也有该峰面积的面积百分比，那简单啊，直接用“面积/面积百分比”那就得到总面积了嘛。所以在 J20 输入“=[面积]/[面积百分比]”，注：不含引号，以下涉及公式处，输入内容均不含引号，如图 3。



图 3

然后将报告另存为“AnalysisReport01.xlsx”，路径为原始路径。如图 4

另存为

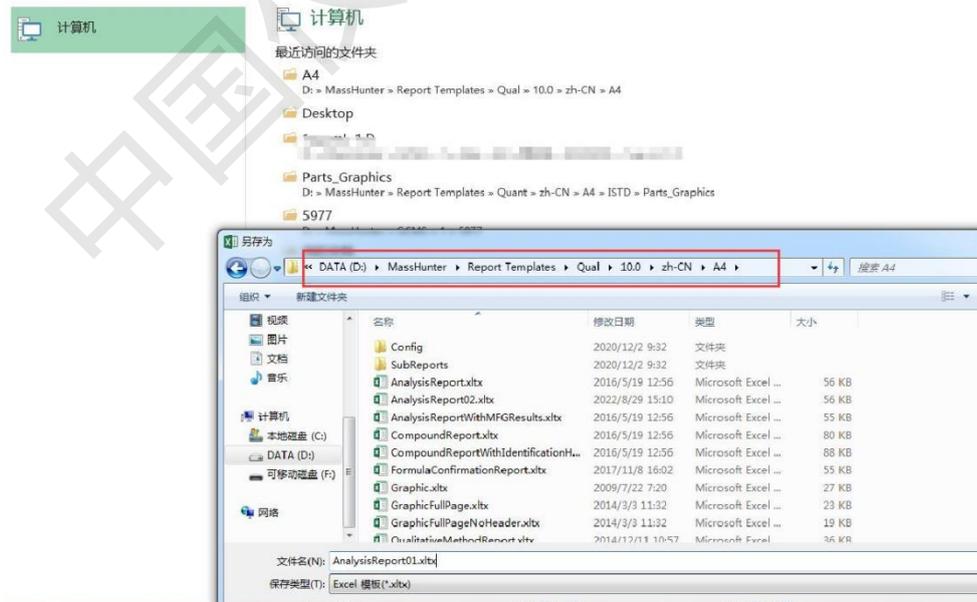


图 4

再预览一下报告，哦耶，总面积出来了。嗯？不对，怎么总面积参差不齐的，啊？更不

对，总面积怎么比单一面积还小呢？如图 5

峰	开始	保留时间	结束	峰高	面积	面积百分比	总面积
1	7.76	7.797	7.883	2454075.63	4392737.21	73.22	59993.67946
2	9.743	9.773	9.831	4163133.69	5110463.25	85.19	59989.00399
3	9.951	9.979	10	1511363.78	1849352.92	30.83	59985.49854

定性分析报告

4	10	10.023	10.08	4693628.69	5999192.64	100	59991.9264
5	10.81	10.849	10.921	3821817.49	5832028.1	97.21	59994.11686
6	12.957	13.003	13.072	2828309.18	5414745.5	90.26	59990.5329
7	13.072	13.112	13.197	2564599.07	4903237.23	81.73	59993.11428
8	15.937	15.984	16.078	2426521.59	5131430.56	85.54	59988.66682
9	16.473	16.512	16.625	2389060.14	5149018.93	85.83	59990.8998
10	19.574	19.61	19.721	1361432.11	3275697.07	54.6	59994.45183

图 5

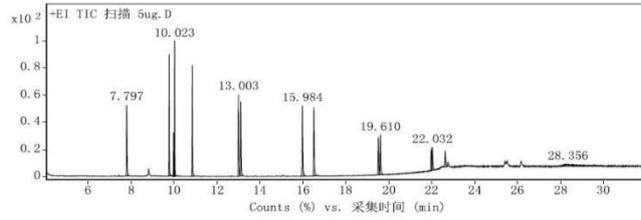
仔细分析一下，哦，原来那个面积百分比不是面积/总面积，而是面积/最大峰面积。重新想想。如果用 sum 这个加和函数呢？那就在 J20 输入“=sum([面积])”，如图 6

ItemID	峰	开始	保留时间	结束	峰高	面积	面积百分比	信噪比	总面积	总面积2
1	7.76	7.797	7.883	7.883	2454075.63	4392737.21	73.22	2454075.63	59993.67946	59993.67946
2	9.743	9.773	9.831	9.831	4163133.69	5110463.25	85.19	4163133.69	59989.00399	59989.00399
3	9.951	9.979	10	10	1511363.78	1849352.92	30.83	1511363.78	59985.49854	59985.49854

图 6

3 结果

再次预览报告，哦耶，这回对了，如图 7.最后结果和手动汇总峰面积一致，目标实现了。



积分峰列表

峰	开始	保留时间	结束	峰高	面积	面积百分比	总面积	总面积2
1	7.76	7.797	7.883	2454075.63	4392737.21	73.22	59993.67946	47057903.41
2	9.743	9.773	9.831	4163133.69	5110463.25	85.19	59989.00399	47057903.41
3	9.951	9.979	10	1511363.78	1849352.92	30.83	59985.49854	47057903.41
4	10	10.023	10.08	4693628.69	5999192.64	100	59991.9264	47057903.41
5	10.81	10.849	10.921	3821817.49	5832028.1	97.21	59994.11686	47057903.41
6	12.957	13.003	13.072	2828309.18	5414745.5	90.26	59990.5329	47057903.41
7	13.072	13.112	13.197	2564599.07	4903237.23	81.73	59993.11428	47057903.41
8	15.937	15.984	16.078	2426521.59	5131430.56	85.54	59988.66682	47057903.41
9	16.473	16.512	16.625	2389060.14	5149018.93	85.83	59990.8998	47057903.41
10	19.574	19.61	19.721	1361432.11	3275697.07	54.6	59994.45183	47057903.41

图 7

中国仪器仪表表学会