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.xltx",如图 1.

	0.2- 0.15- 0.1- 0.05-	
方法编辑器:报告		× 7 8
🛆 🖉 🖬 🖏 🔊 •	▶ • ● 打印工作流程报告 •	
□ 方法自动处理	目标文件 模板 布局 内容	ЩMSI
工作流程	◎ 使用 PDF 报告生成器	^ ⊉ ↔
附加色谱图	◎ 使用 Microsoft Excel®	
报告	报告模板文件夹	
导出	assHunter\Report Templates\Qual\10.0\zh-CN\A4	
由 色谱图		
● 质谱图	报告模板 目标物筛选:	E
⊞ 识别	TargetCompoundScreeningReport.xltx 👻	
	样品纯度:	
	FormulaConfirmationReport.xltx 💌	
	化合物探索:	
	CompoundReportWithIdentificationHits.xltx 🔹	
	自定义:	
	AnalysisReport.xltx 👻	
	定性方法:	-

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.xltx",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.



然后将报告另存为"AnalysisReport01.xltx",路径为原始路径。如图 4

另存为						
🛅 计算机	口 计算机	T.				
	最近访问的文	件夹				
	μα ΔΔ					
	D: » Massi	Hunter » Report Templates » Qual » 10.0 » zh-0	CN = A4			
	🗀 Desktop					
	Parts Gr	1.D aphics				
	D: » Massi	Hunter » Report Templates » Quant » zh-CN » /	A4 » ISTD » Parts_Gr	aphics		
	▼ 另存为					
		D:) • MassHunter • Report Templates • 0	ual + 10.0 + zh-Cl	N + A4 +	- to 100 A	
		on a massimiliar a neport templates a q			· [·]]] [22.74	
	组织 ▼ 新建文件夹					8≡ ▼
	📲 视频 🔷	名称	修改日期	类型	大小	
	■ 图片	Config	2020/12/2 0-32	文任本		
	文档	SubReports	2020/12/2 9-32	文件大		
	2 音乐	Analysis Report xltx	2016/5/19 12:56	Microsoft Excel	56 KB	
		Analysis Report02.xltx	2022/8/29 15:10	Microsoft Excel	56 KB	
	🌉 计算机	AnalysisReportWithMFGResults.xltx	2016/5/19 12:56	Microsoft Excel	55 KB	
	ALL 本地磁盘 (C:)	CompoundReport.xltx	2016/5/19 12:56	Microsoft Excel	80 KB	
	C DATA (D:)	CompoundReportWithIdentificationH	2016/5/19 12:56	Microsoft Excel	88 KB	
	可称动装盘 (E) 目	FormulaConfirmationReport.xltx	2017/11/8 16:02	Microsoft Excel	55 KB	
		Graphic.xltx	2009/7/22 7:20	Microsoft Excel	27 KB	
	0 Ditt	GraphicFullPage.xltx	2014/3/3 11:32	Microsoft Excel	23 KB	
	- POND	GraphicFullPageNoHeader.xltx	2014/3/3 11:32	Microsoft Excel	19 KB	
		CualitativeMethodReport vity	2014/12/11 10:57	Microsoft Excel	36 KR	
	文件名(N): Anal	ysisReport01.xltx				
	保存类型(T): Exce	模板(*.xltx)				

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

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						
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						

Agilent Technologies

```
Page 1 of 2
```

Printed at: 15:22 on: 2022/8/29

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

its.	ž G		字	体			G.		对齐	方式		「 数	字	5						样式		
	* :	>	< 🗸 fs	-	=SUM([@	 雨积	(])															
	A		В		С		D	2		E		F		G		Н	1		J	К		L
	CMD:Repeat ItemID	-	ItemID 数据文件名称	-	样品名称	-	样品类型	-	位置		- 0	器名称	*	用户名 🔻	-	采集方法 🚽	采集时间	✓ IRM [‡]	交正₩ -	DA方法	* 12	E释
	CMD:EndRepea	+	ItemID																			
	CMD:Repeat		ItemID																			
	ItemID	-	發解电压	-	碰撞能量	-	电离模式	F	1													
	ItemID	•	图谱文件	-				1														
	积分峰列表			1																		
t	ItemID	-	峰	*	开始	7	保留时间	*	结束		~ 15		*	面积 一	- 1	面积百分比 ~	信噪比	· 总面积 #D	t - 1V/0!	总面积2	-	
	噪音测量 ItemID	-	噪音类型	+	信号定义	-	噪音乘数	+	噪音值	1	-				-							
	噪音区域					_		ŕ			-											
	ItemID	+	开始	+	结束	*																
	CMD:EndRepea	t	ItemID	1		-																

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。



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