

MetQuest 快速入门手册

使用 Thermo MetQuest™ 代谢物稳定性筛选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。若要利用手册内的步骤采集和处理样品数据，必须已经按照 *MetQuest User Guide* (*MetQuest 用户手册*) 中的描述创建处理方法和仪器方法。

- 定义组和样品信息
- 指定配置信息
- 提交实验并查看结果

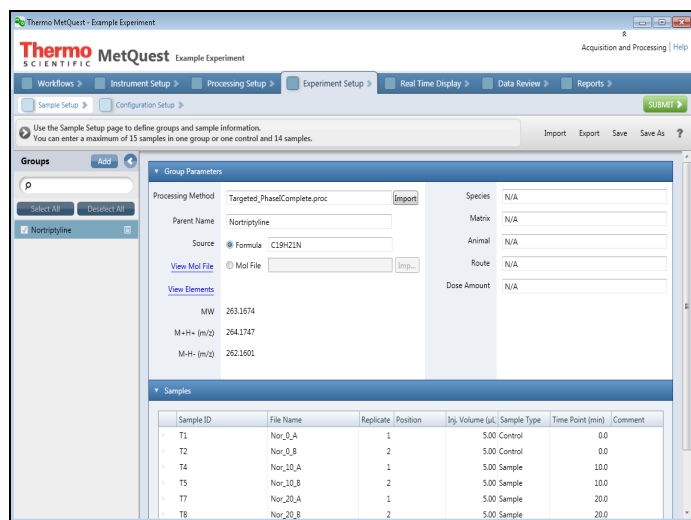
定义组和样品信息

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。



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 文件导入的信息，参阅 *MetQuest User Guide* 中“利用组和样品信息创建文件”。
- 输入样品信息：在 Sample Setup 视图输入实验信息。

导入一个样品列表文件

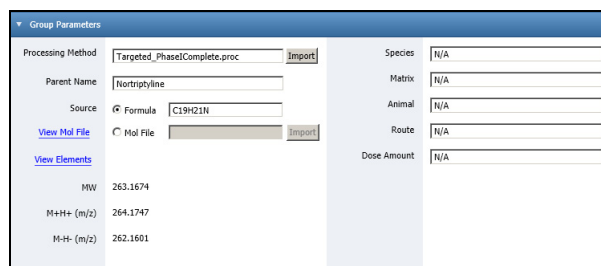
❖ 若要导入一个包括样品信息的文件进行采集

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。
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 （组）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 （组参数）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。
若尚未完成处理方法，参阅 *MetQuest User Guide*。



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。

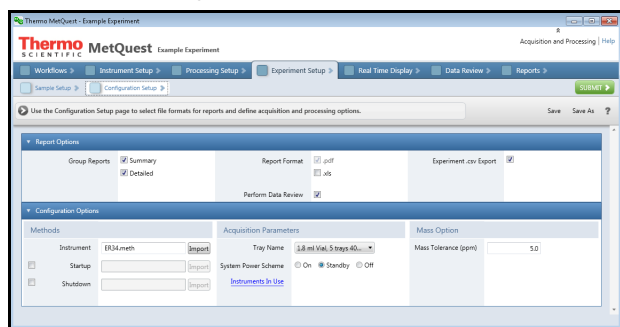
根据需要在 Group Parameters 区域内输入其他信息。应用程序在总结和详细报告中显示 Sample ID （样品识别号）、Replicate Number （重复数）、Species （种类）、Matrix （基质）、Animal# （动物编号）、Route （途径）和 Dose Amount （剂量）值。

5. 在开始采集样品数据之前在 Samples（样品）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。
 - 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**（配置设置）。



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。
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）。
7. 单击 **Instruments in Use**（所用仪器）。
8. 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

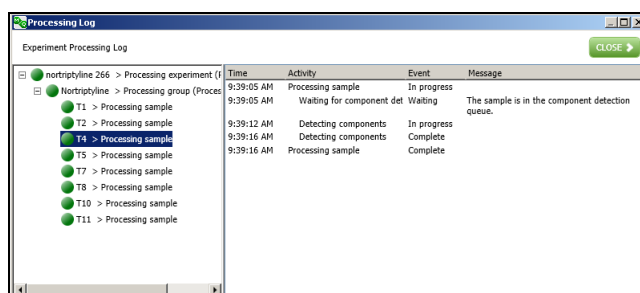
1. 在 Sample Setup 视图中单击 **Submit** 处理样品。

- 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。

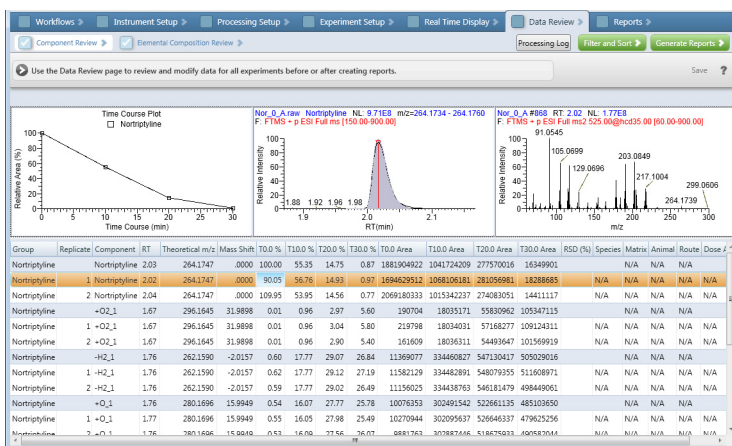
如果样品瓶或板位置或进样体积不正确，应用程序信息栏显示指定有效值范围的信息。

- 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）选项卡查看处理。



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，在此可以过滤或排序数据。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。



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。

