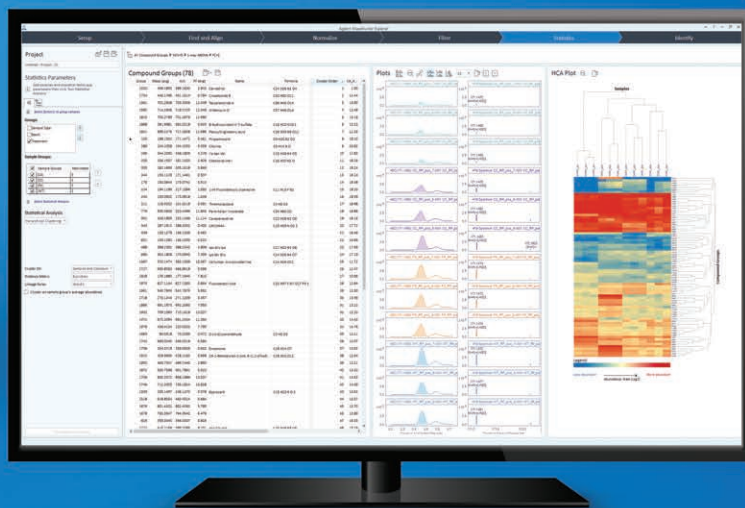


# 从复杂的数据中 获取关键见解

用于非靶向 LC/Q-TOF 数据的 Agilent MassHunter Explorer 软件





Agilent MassHunter Explorer

Setup Find and Align Normalize Filter Statistics

Project: Project-01

Statistics Parameters

Compound Groups (728)

Group	Mass (a.u.)	m/z	RT (min)	Area	Peak	Retention	Abundance	Height
2	224.1422	225.1494	8.590	5.23E+0	3.85E-7	2.31E-4	2.34E-4	2
140	448.2833	449.2907	8.590	1.21E+0	4.10E-7	2.31E-4	2.37E-4	2
28	332.1793	333.1824	8.744	2.13E+0	4.10E-7	2.31E-4	2.67E-4	2
13	276.1732	279.1624	9.251	2.79E+0	4.10E-7	2.31E-4	3.46E-4	2
1148	559.3156	560.3281	8.811	3.05E+0	4.10E-7	1.00E-2	3.00E-2	2
731	414.2742	415.2832	8.147	3.38E+0	4.10E-7	2.31E-4	2.31E-4	2
30	210.1108	211.1180	9.777	6.58E+0	6.18E-7	2.31E-4	2.31E-4	2
232	392.2835	393.2909	11.998	8.80E+0	6.18E-7	2.31E-4	2.31E-4	2
536	454.2381	477.2329	5.055	8.60E+0	6.96E-7	1.00E-2	1.57E-2	2
513	958.5341	480.2649	9.763	1.74E+0	1.27E+0	2.31E-4	4.48E-4	2
1387	1224.2904	1227.2998	14.283	3.44E+0	2.28E+0	1.27E+0	2.31E-4	2
979	522.2955	523.3024	9.231	4.98E+0	2.68E+0	2.31E-4	4.97E-4	2
927	786.6215	394.3162	12.961	5.51E+0	3.28E+0	2.31E-4	2.31E-4	2
1241	958.5104	480.2649	9.231	7.49E+0	4.02E+0	2.31E-4	2.38E-4	2
163	392.2885	393.3039	12.731	9.25E+0	4.49E+0	2.31E-4	2.49E-4	2
19	163.3460	575.3354	9.779	1.08E+0	4.87E+0	2.31E-4	3.68E-4	2
724	954.5741	955.5789	13.178	1.14E+0	4.87E+0	2.31E-4	2.32E-4	2
47	294.1840	517.1736	8.927	1.27E+0	5.12E+0	2.31E-4	6.11E-4	2
515	144.0854	165.0933	7.281	1.98E+0	6.01E+0	2.31E-4	5.19E-4	2
841	578.2789	293.1467	8.990	1.65E+0	6.01E+0	2.31E-4	4.42E-4	2

Plots

ANOVA - Post Hoc Results

Group	[WT]	[CA]	[CC]	[FK]
[WT]	728	548	354	431
[CA]	134	729	289	225
[CC]	374	429	718	289
[FK]	107	500	418	718

Legend

- Differentially abundant
- Not Differentially abundant

Results Summary

	p=0.05	p<0.01	p<0.001	p<0.005	p<0.001
Corrected p-value	728	728	706	559	447
Expected by chance	86	14	5	3	3

# 了解 LC/Q-TOF 的理想配套工具， 实现快速、可靠和简单的非靶向 数据分析

安捷伦高分辨率 LC/Q-TOF 仪器可提供丰富的非靶向数据，具有出色的精密度、准确度和动态范围。虽然丰富的数据可以提供深入、全面的见解，但是难以发现并识别目标化合物。

MassHunter Explorer 专为使非靶向数据分析更轻松、更快速、更智能而设计。一体化用户界面将高级数据提取与归一化、统计分析、可视化和鉴定程序无缝结合。这些工具整合在一款易于使用的应用程序中，可帮助您快速、可靠地分析数据，从而提高研究效率。

作为 Agilent MassHunter 软件套件的一部分，MassHunter Explorer 是 Q-TOF LC/MS 非靶向筛查应用的理想选择，以找到来自不同条件的样品或样品组之间存在差异的化合物。



食品



环境



可浸提物与  
可沥滤物



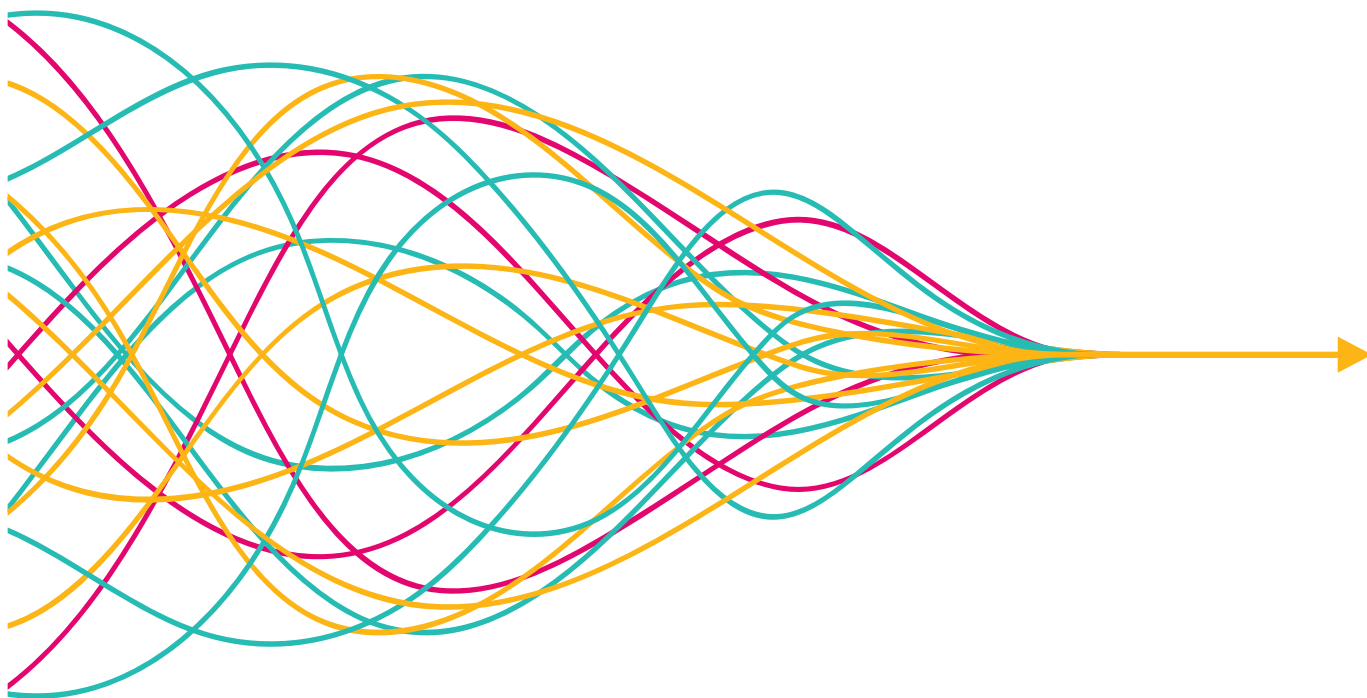
法医毒理学



组学



天然产物



## 从复杂数据中获得清晰结果的简单、高效途径

MassHunter Explorer 设计为对新用户和高级用户均适用，在一个软件包中提供全面的分析和可视化功能。其直观的工作流程驱动的界面将引导您设置实验、提取数据以及使用差异分析来发现并识别目标化合物。

显著的性能增强结合简化的分析结果呈现，能够使您更轻松的分析数据并从中获取信息，而无论您之前使用非靶向工作流程的经验如何。新用户可以使用预加载的优化设置进行数据分析，而高级用户可以针对不太常见的应用定制设置。

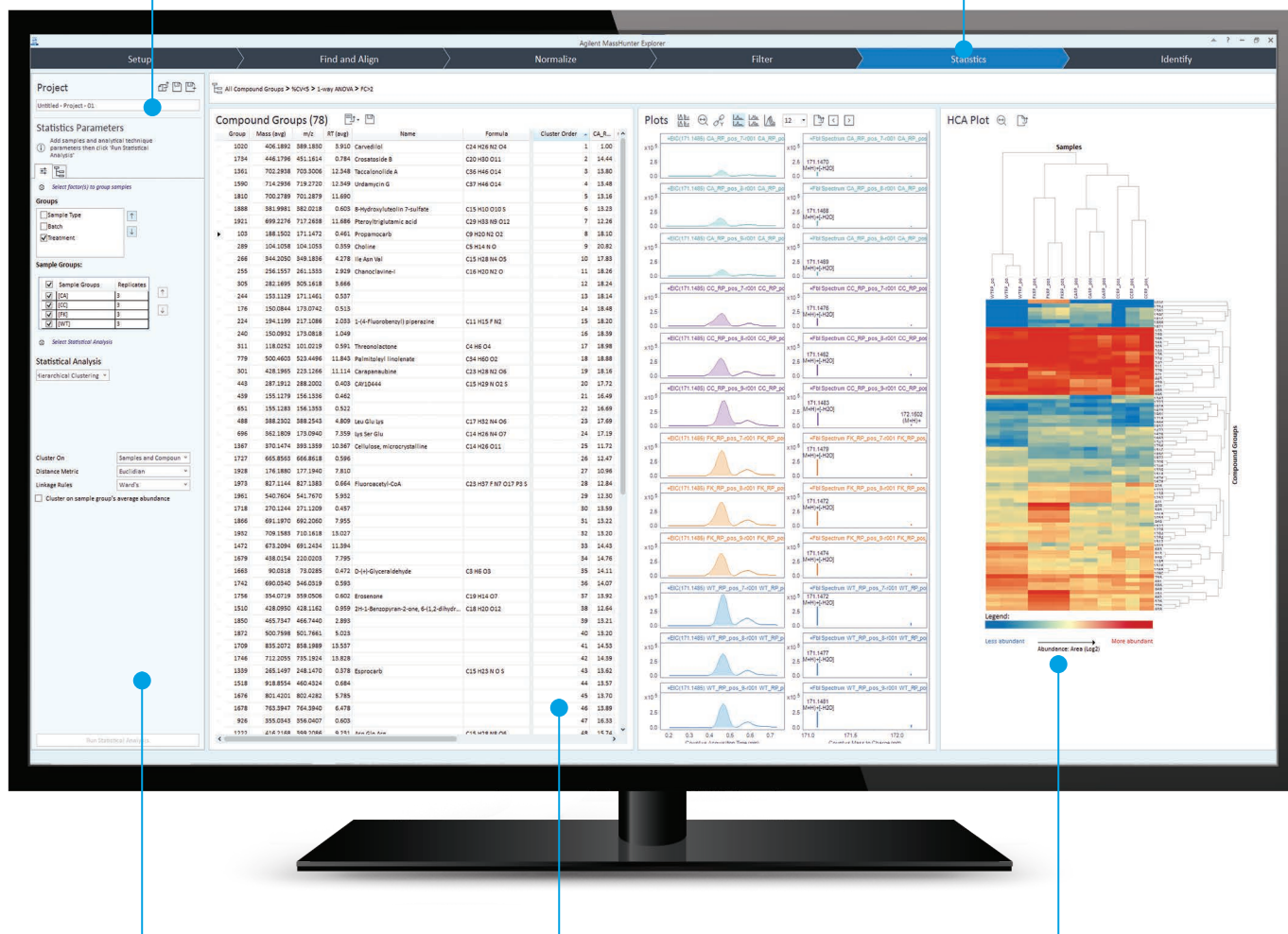
如有必要，数据可以轻松导出至 MassHunter 定性和定量数据分析软件中，或用于更高级的统计分析程序，如 Mass Profiler Professional、R 和 Python。



## Agilent MassHunter Explorer: 一体化、直观的工作流程

基于项目的工作流程使新用户和专家均可轻松进行设置转移。

简化的一体化程序可快速导航。



多种统计算法为给定数据提供合适的工具。

采集过程中的预处理可加快数据处理速度。

图形化显示色谱、质谱和统计数据，便于快速查看。

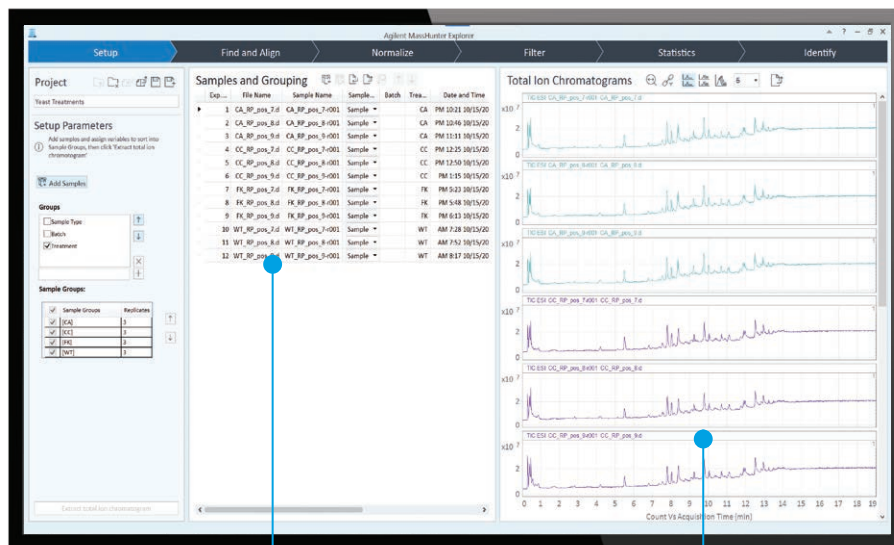
MassHunter Explorer 将引导您完成非靶向筛查所需的设置条件、数据提取、归一化、过滤、统计分析和鉴定程序。新用户可使用由专家创建的处理方法，从而缩短学习过程。还可以在整个组织中共享方法，确保结果一致并尽可能减少错误。



## 通过简单步骤揭示并聚焦于重要结果

### 设置实验设计

首先添加采集的数据并为每个样品定义样品类型（包括新的混合 QC 选项）、批次和自定义分组变量。色谱图经过排列、着色，并可以叠加，使您可以在实施接下来的步骤之前审查重现性。

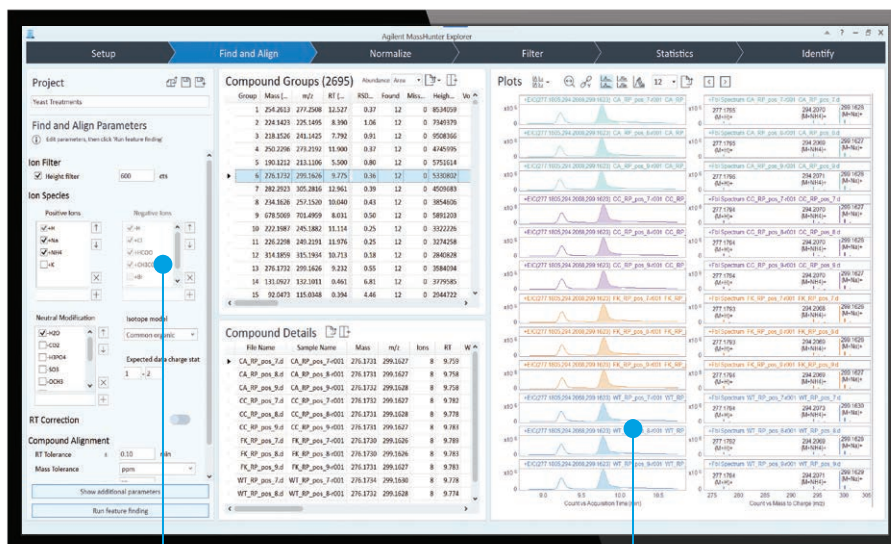


载入样品并定义与每个样品相关联的组。

通过查看色谱图来检查重现性。

## 发现并比对所有样品中的化合物

发现和比对步骤使用非靶向算法从每个样品中提取化合物，然后按质量数和保留时间比对各样品中的化合物。

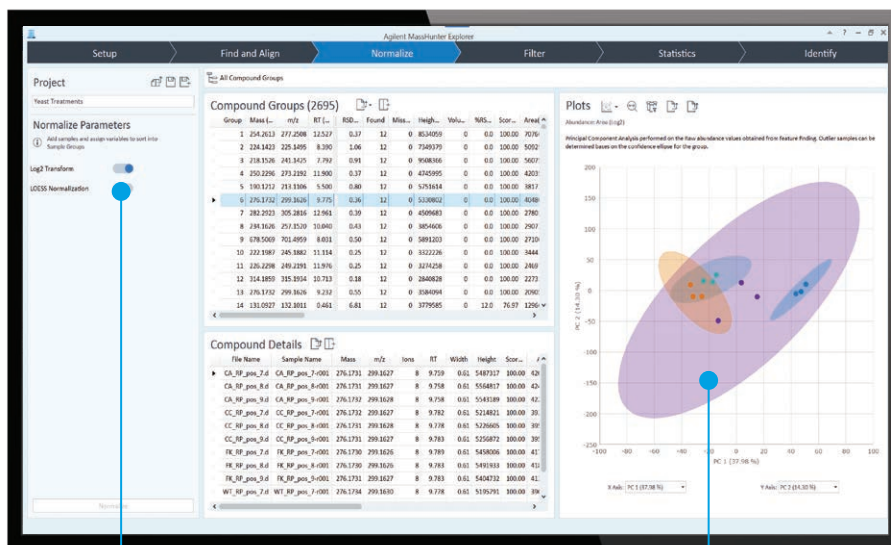


根据样品化学性质评估参数。

查看提取离子色谱图和质谱图。

## 归一化和过滤数据以去除意外变化

样品前处理或仪器变化可能导致不必要的系统误差，从而导致批间差异。可使用局部估计散点图平滑 (LOESS) 归一化技术来减少这些误差。针对丰度、重现性或特定样品组中存在情况的过滤器可帮助您聚焦于目标化合物。在这些步骤中，主成分分析 (PCA) 使您能够在应用归一化和过滤过程中审查数据质量。



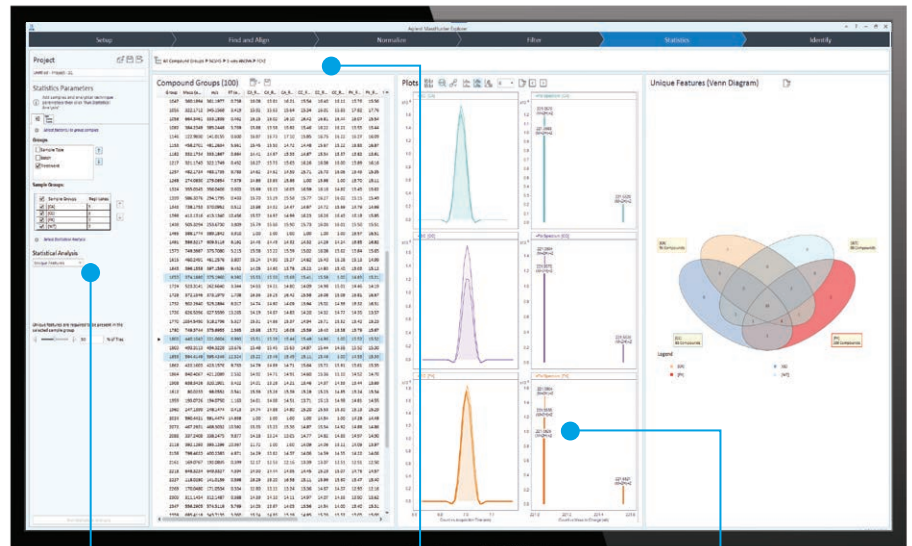
选择归一化选项。

通过 PCA 审查样品分组。



## 聚焦于重要化合物

统计分析技术可帮助您找出样品组之间存在显著差异或共同具有的化合物。用于发现目标化合物的工具包括 T 检验、倍数变化分析、火山图、单因素或双因素方差分析以及层次聚类分析 (HCA)。审查这些技术的结果以及仪器数据，以立即实现可视化和验证。



通过从统计分析技术列表中进行选择，发现重要的目标化合物。

追踪过滤化合物列表以聚焦于重要化合物的过程。

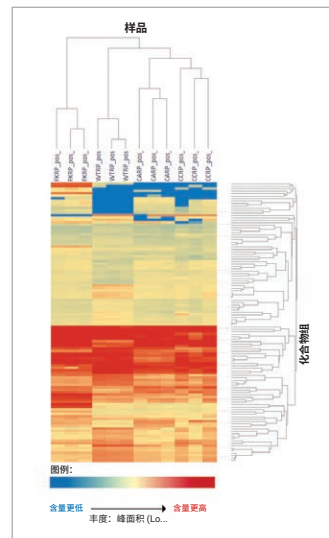
查看与您的统计分析结果相关的 EIC 和质谱图。

链接导航使您能够以交互方式选择表格或图（如色谱图、谱图或统计图）中的化合物，以便轻松解释结果。所有图和化合物列表均可轻松导出。

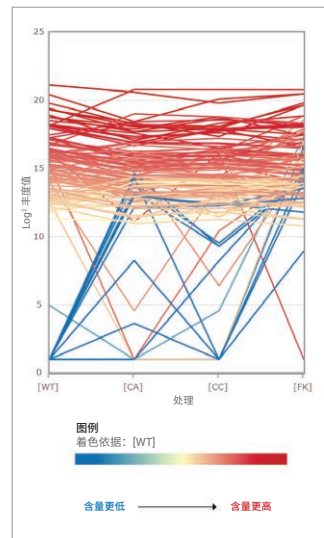
### ANOVA 事后分析结果



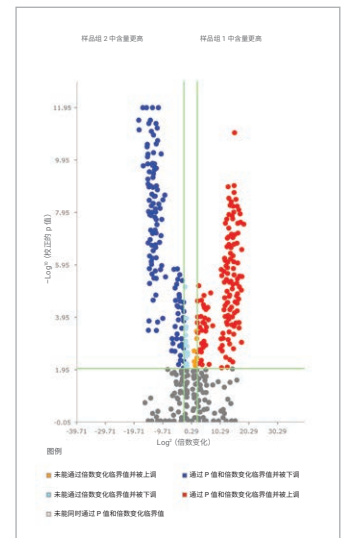
### HCA 图



### 倍数变化图



### 火山图



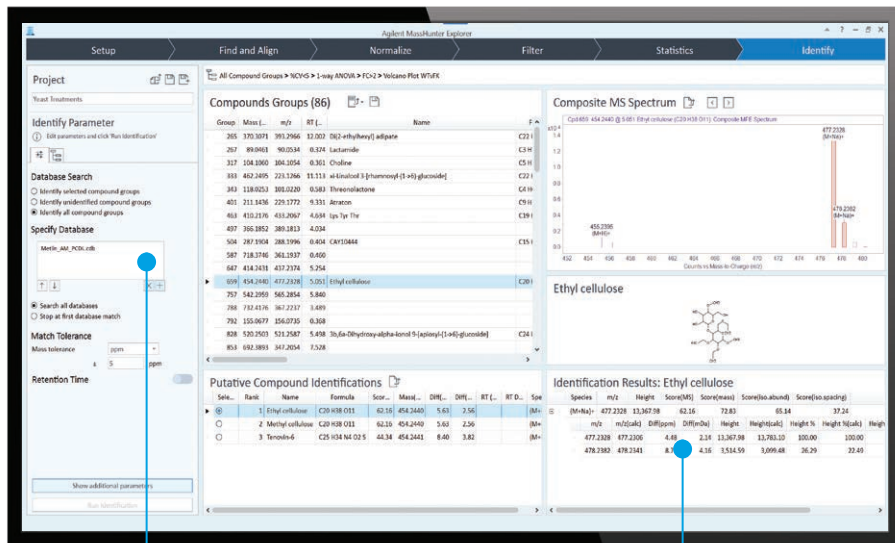


## 鉴定目标化合物

如果发现目标化合物，即在识别步骤中进行推断鉴定。化合物鉴定算法经过优化，能够将实测数据与理论精确质量和同位素模式进行匹配，并可选择将保留时间标注到化合物数据库中。

高度优化的安捷伦化合物数据库可直接在 MassHunter Explorer 中使用。这些数据库包含食品、环境、法医学、制药、可浸提物/可沥滤物、水质筛查、代谢组学和脂质组学等行业内的目标化合物。

Agilent ChemVista 软件中也提供开放式公共谱库和数据库（例如 MassBank 或 MoNA）中的数据。



将分析物与数据库中包含的化合物进行匹配。

审查推断鉴定证据。



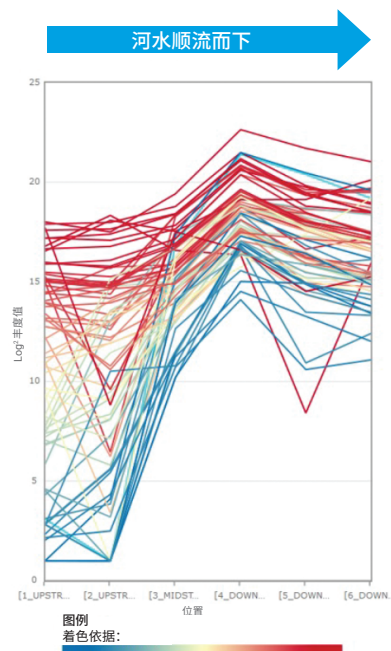
## 环境应用

# 发现并识别河水中的新型污染物

LC/Q-TOF 系统是用于检测污染环境的新污染物、代谢物和微生物降解产物的出色工具。可能难以发现并识别这些物质，因为很少有标准品可用，并且在每个样品中可能会检出数千个峰。

在此示例中，河水样品采集自原始上游源头位置（对照）和城市中心下游。目标是测量废水对水质的影响。将 LC/Q-TOF 与 MassHunter Explorer 数据解析相结合的精确质量分析使研究人员能够在从下游位置采集的样品中识别并推断鉴定出重要的环境化合物。

分析人员无需辛苦地评估数千个潜在的峰，能够专注于影响环境的重要化合物。结果：快速、简单地表征废水影响，并鉴定已知和未知污染物。





## 代谢组学应用

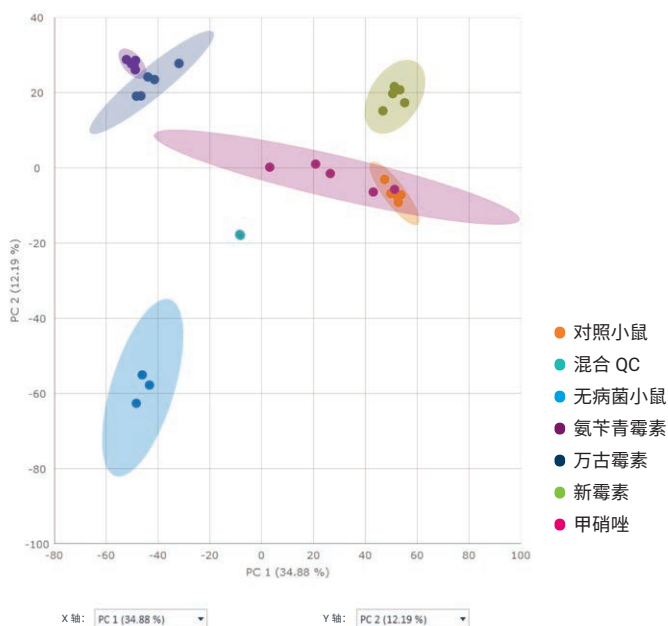
# 破译肠道微生物组对代谢组的影响

Q-TOF LC/MS 的应用涵盖基础、转化和临床研究，使研究人员能够分析复杂样品基质中的数千种代谢物，完成化合物发现。

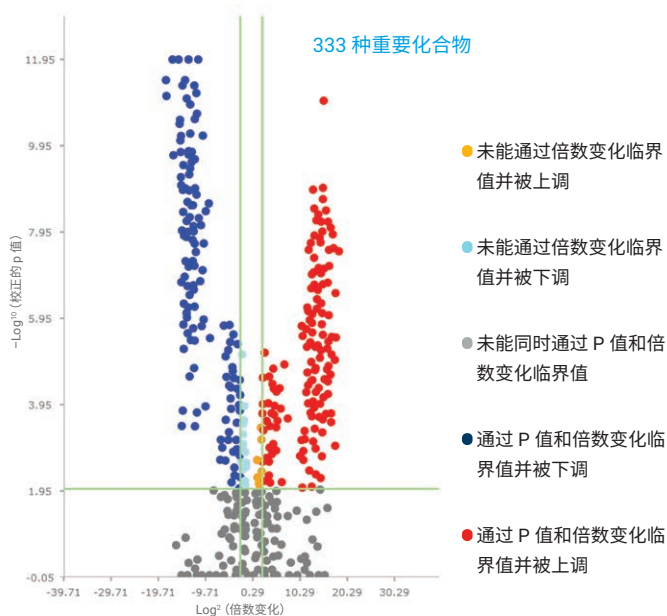
在此示例中，考察了抗生素治疗对盲肠代谢组的影响。提取用四种不同抗生素治疗的小鼠和缺乏微生物组的无病菌小鼠的盲肠内容物，并使用全新 Agilent Revident LC/Q-TOF 进行分析。

MassHunter Explorer 数据解析证明即使不进行进一步过滤和统计也能立即进行样品分组。使用火山图梳理出 333 种潜在的微生物源性和/或微生物改变的代谢物。

35 个样品的 PCA，代表 5067 种化合物



对照小鼠 vs. GF 小鼠的火山图



无需辛苦地评估数千个潜在的峰，PCA 分析可快速识别样品组，并在火山图中揭示出重要物质。结果包括对不同样品进行快速、简单的表征，并揭示独特的分析物。

## 智能功能带来无限可能

新一代安捷伦 LC/Q-TOF 仪器和软件以持续创新为基础，可帮助您优化实验室运营。它们不止是仪器，还包括节省时间的智能功能、高效的工作流程以及由值得信赖的合作伙伴提供的服务。因此，您可以专注于更有价值的创造性工作，并解决遇到的每一项挑战。

了解更多信息：

[www.agilent.com/chem/masshunter-explorer](http://www.agilent.com/chem/masshunter-explorer)

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

安捷伦客户服务中心：

**免费专线：**

**800-820-3278**

**400-820-3278（手机用户）**

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

DE72621435

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2023  
2023 年 6 月 5 日，中国出版  
5994-6107ZHCN