

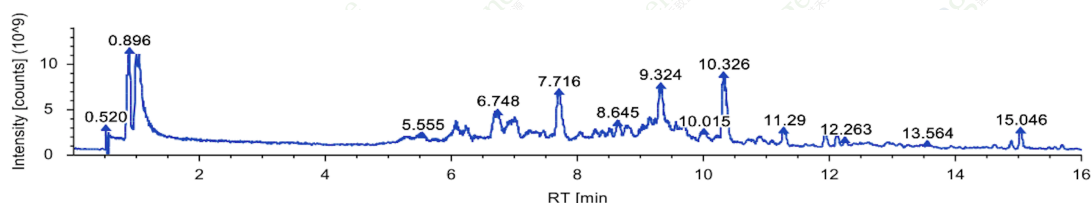
报告涉及相关名词解释

液相色谱-质谱联用技术

液相色谱-质谱联用技术，它是色谱作为分离系统，质谱作为检测系统，将色谱的分离能力和质谱的定性功能结合起来，检测不同物质的技术。

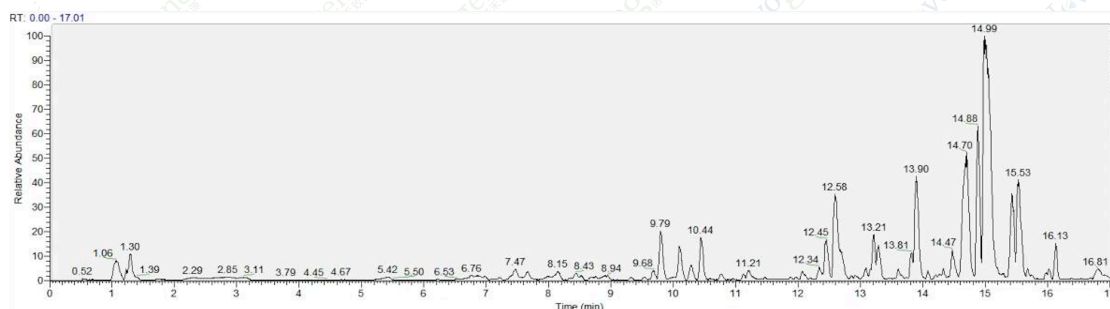
TIC

总离子流图（Total ion chromatogram, TIC），是指在选定的质量范围内，所有离子强度的总和对时间所作的图，是每个时间点质谱图中所有离子强度的加和。



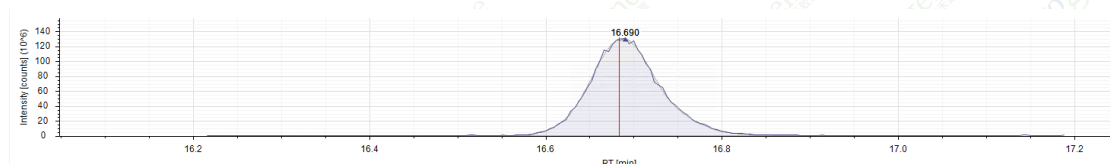
BPC

基峰图（Base Peak Chromatogram, BPC），是将每个时间点质谱图中最强的离子的强度连续描绘得到的图谱。



XIC

提取离子流图（Extracted ion chromatogram, XIC），为某个特定质荷比的母离子的色谱图，XIC 图的峰面积可以用于定量分析。



pos、neg 扫描方式

分别指正离子模式（pos）和负离子模式（neg）。由于代谢物化学性质不同，在质谱电离过程中有些代谢物易带正电荷、有些代谢物易带上负电荷，两亲性代谢物既可以带正电荷也可以带负电荷。因此，质谱在检测过程中常采用正离子扫描、负离子扫描两种扫描模式进行数据采集。

CV

变异系数（Coefficient of Variance, CV），是标准差与均值的比率，用来衡量样品各观测值变异程度的一个统计量，可以反映数据的离散程度，判定稳定性的优劣。

分辨率

分辨率（Resolution），是指质谱仪区分两个质量相近的离子的能力。计算公式：分辨率 = 观测的一个质谱峰的质荷比/半峰高处的峰宽。

数据库匹配结果解释

代谢物鉴定结果优先级为 mzCloud>mzVault>MassList。

Full match: Feature 在质量容差范围内能完全匹配上该数据库中代谢物的信息；

No Results: Feature 在质量容差范围内不能匹配上该数据库中任何代谢物的信息；

Not the Top Hit: Feature 在优先级更高的数据库中鉴定到的代谢物，在该数据库中不是匹配到最优的代谢物；

Partial Match: Feature 在该数据库中鉴定到的代谢物，只有分子式与更高优先级数据库中鉴定到的代谢物相同，但名称不同；

Invalid mass: mzCloud 中表示母离子超出质量容差范围，但子离子碎片匹配上该数据库中代谢物的信息；

No match: Feature 在该数据库中鉴定到的代谢物与在更高优先级数据库中鉴定到的代谢物均不同。