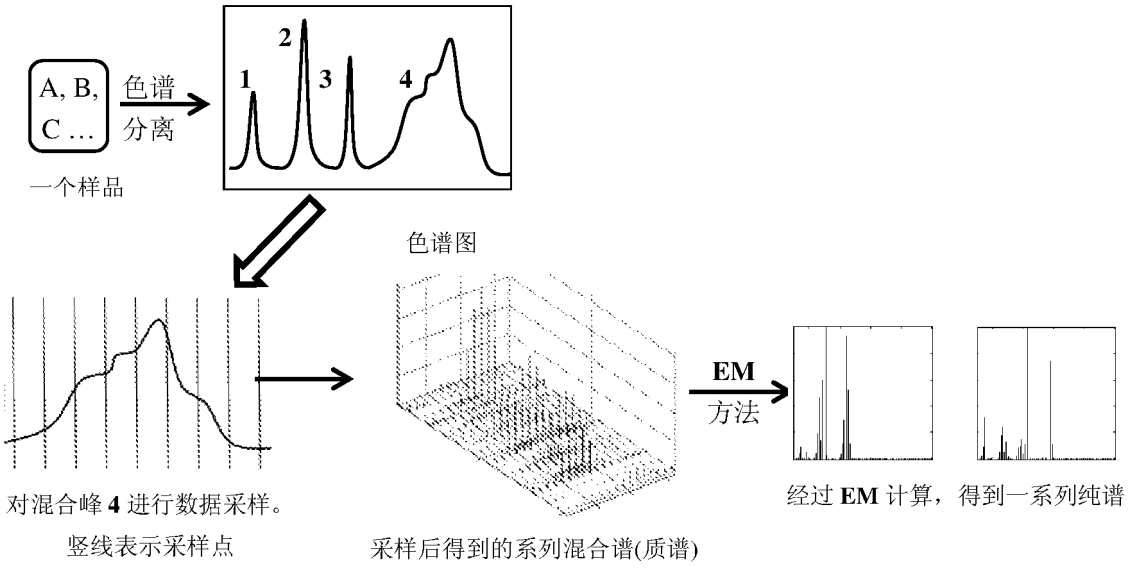

A, B,
C …
色谱
分离
一个样品
1
2
3
4
色谱图
对混合峰 4 进行数据采样。
竖线表示采样点
采样后得到的系列混合谱(质谱)
EM
方法
经过 EM 计算，得到一系列纯谱

图 1

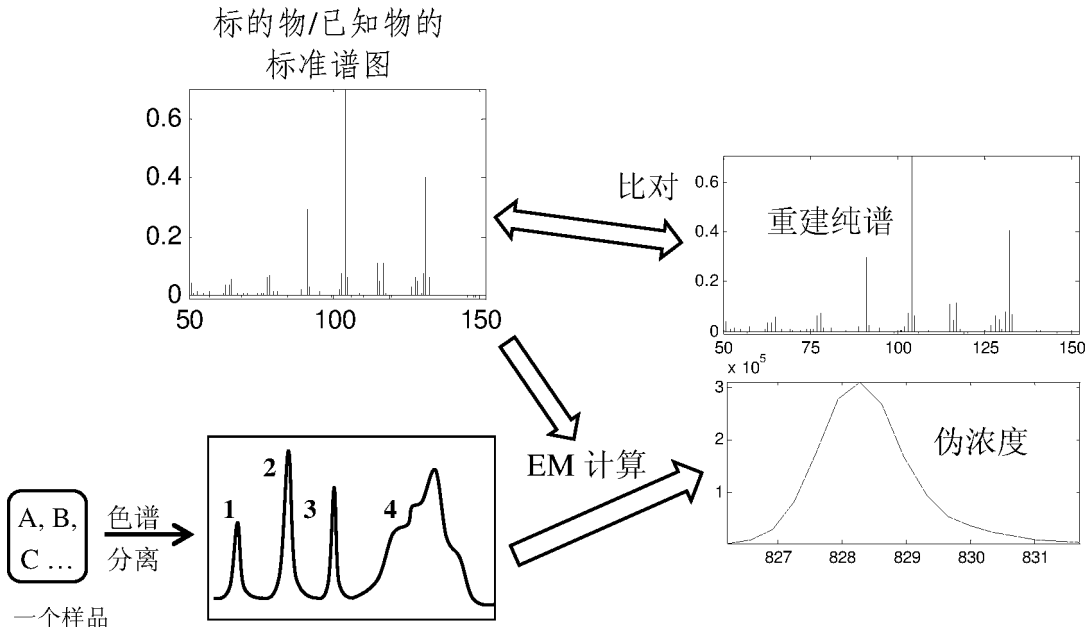

标的物/已知物的
标准谱图
0.6
0.4
0.2
0
50
100
150
比对
重建纯谱
0.6
0.4
0.2
0
50
75
100
125
150
x 10^5
3
2
1
827
828
829
830
831
伪浓度
EM 计算
A, B,
C …
色谱
分离
一个样品
1
2
3
4

图 2

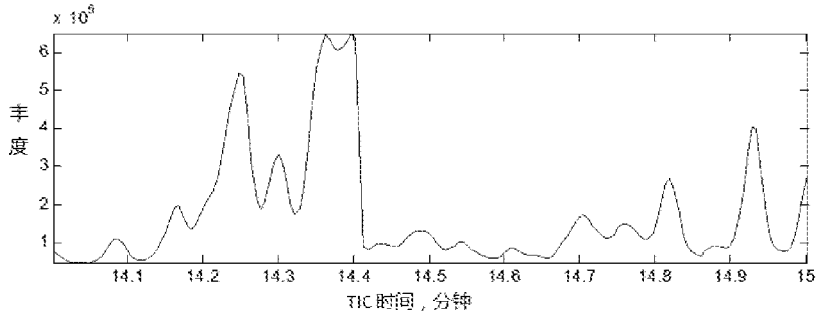

x 10^9
丰度
TIC时间，分钟

图 3

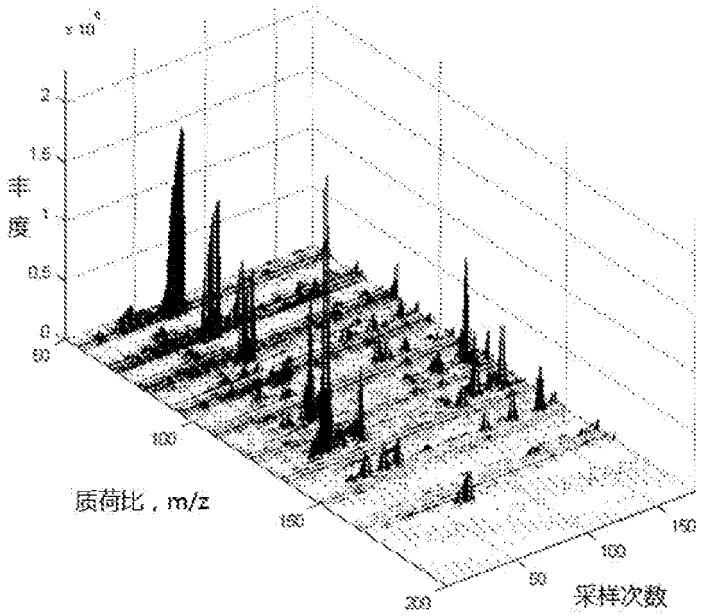

丰度
质荷比，m/z
采样次数

图 4

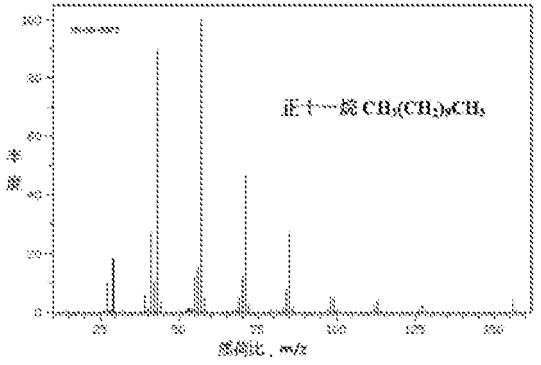

正十一烷 $CH_3(CH_2)_9CH_3$
丰度
质荷比，m/z

图 5-1

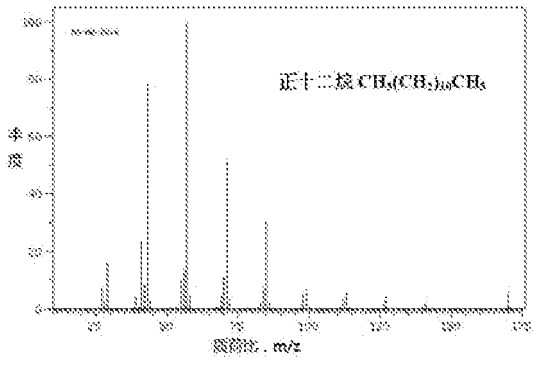

正十二烷 $CH_3(CH_2)_{10}CH_3$
丰度
质荷比，m/z

图 5-2

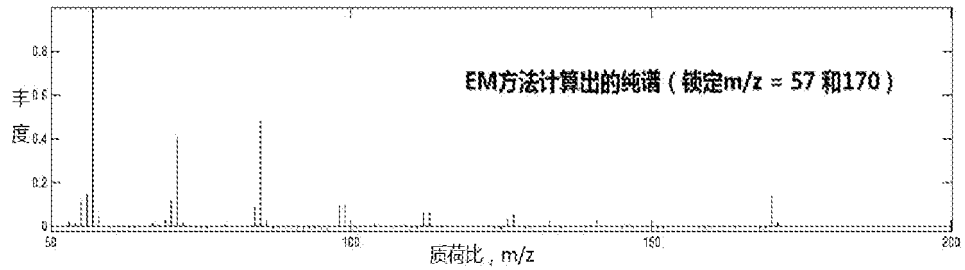


图 6-1

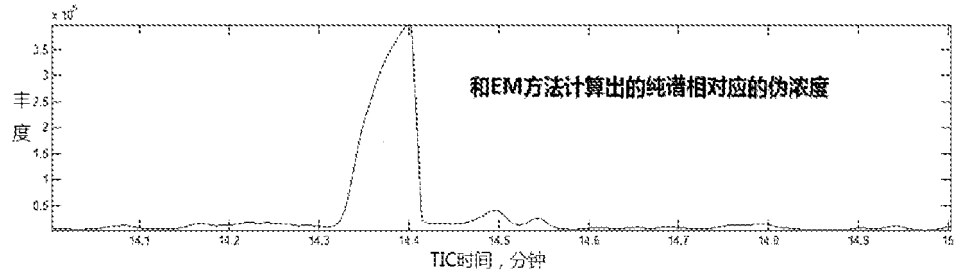


图 6-2

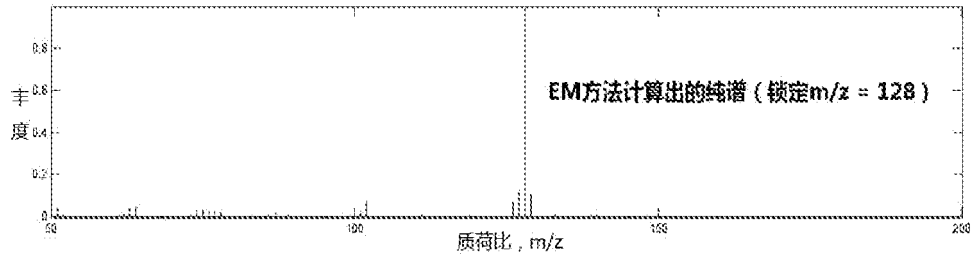


图 7-1

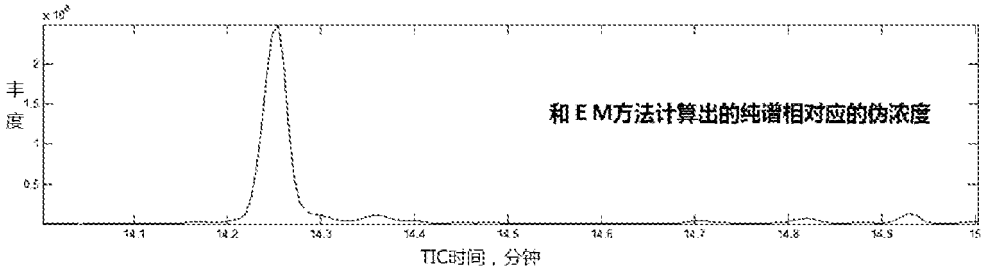


图 7-2

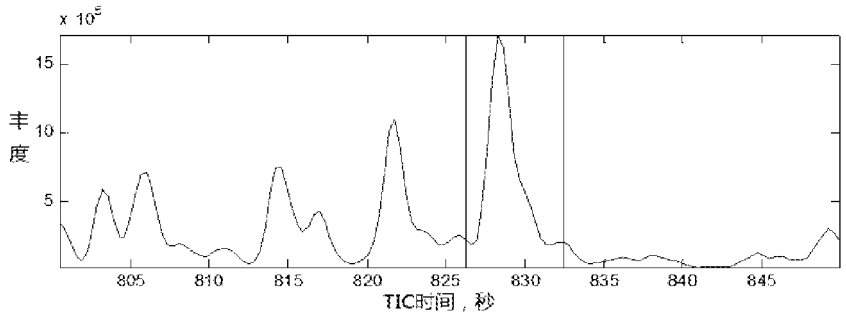


图 8

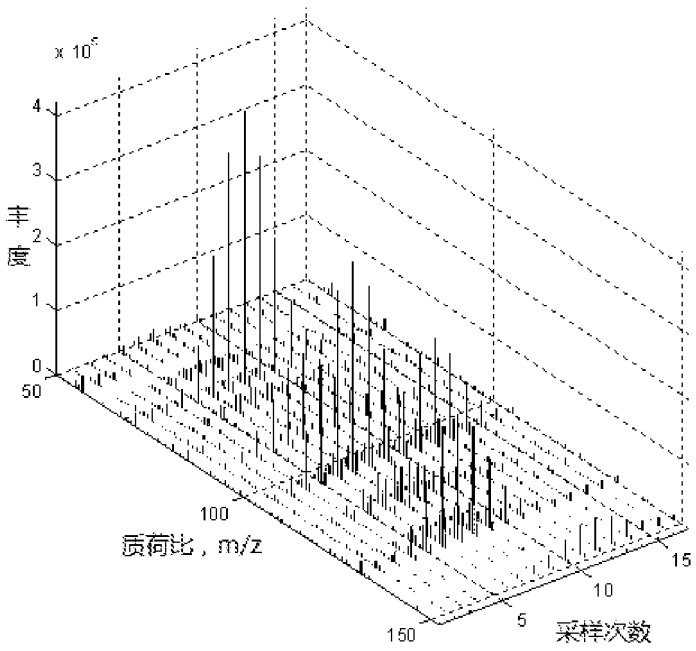

x 10^5
4
3
2
1
0
丰度
50
100
150
质荷比，m/z
5
10
15
采样次数

图 9

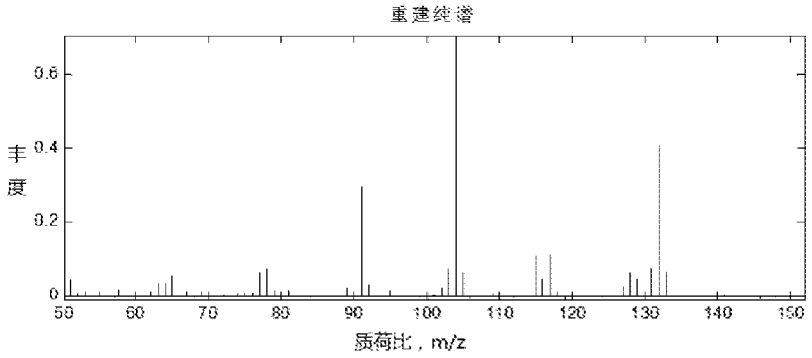

重建纯谱
0.6
0.4
0.2
0
丰度
50
60
70
80
90
100
110
120
130
140
150
质荷比，m/z

图 10-1

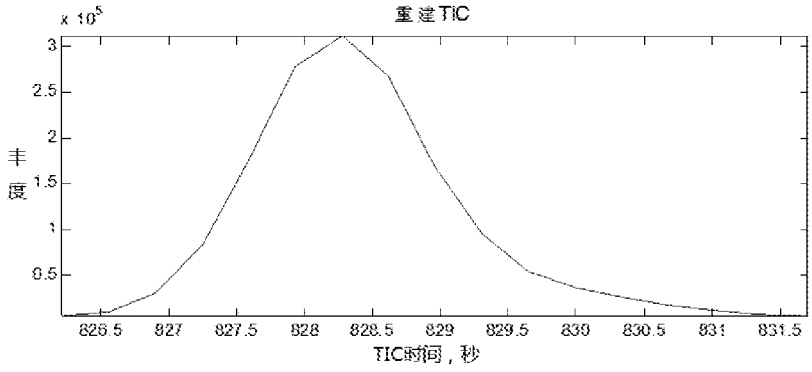

x 10^5
重建TIC
3
2.5
2
1.5
1
0.5
丰度
826.5
827
827.5
828
828.5
829
829.5
830
830.5
831
831.5
TIC时间，秒

图 10-2

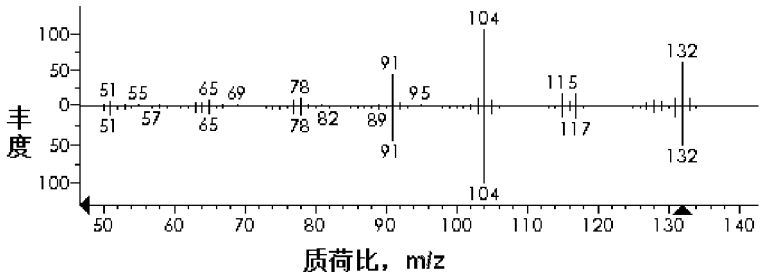


图 11

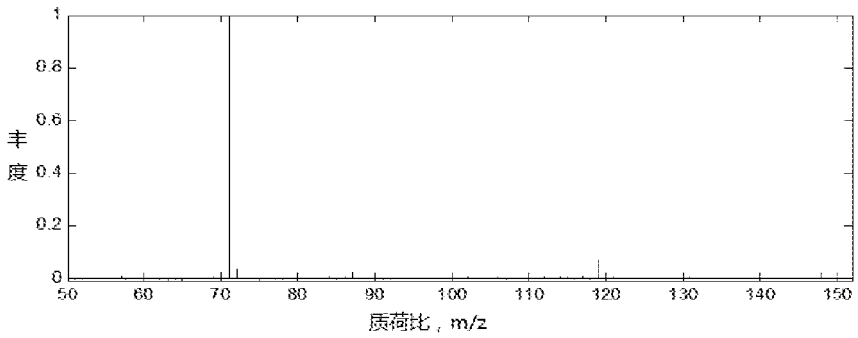


图 12-1

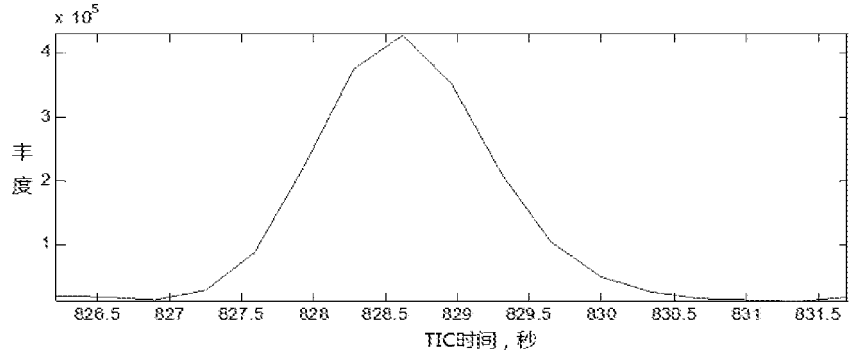


图 12-2

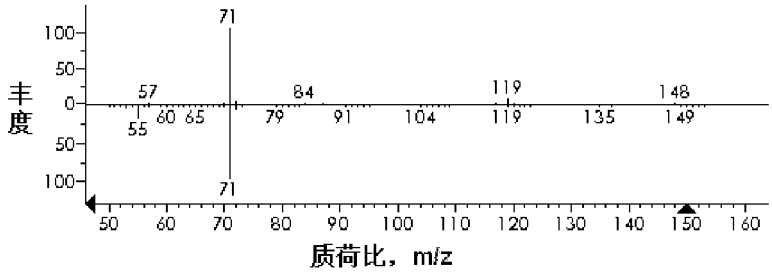


图 13

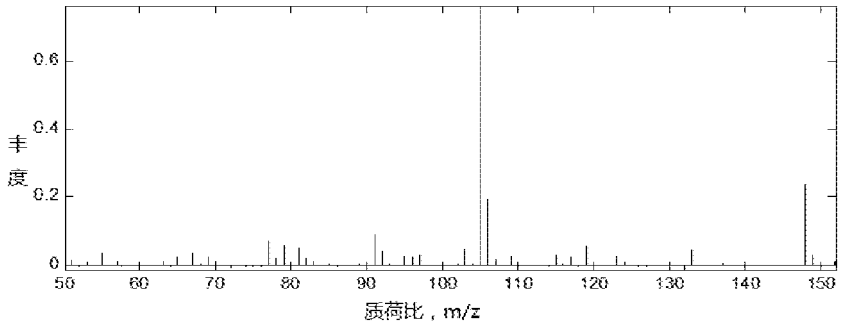


图 14-1

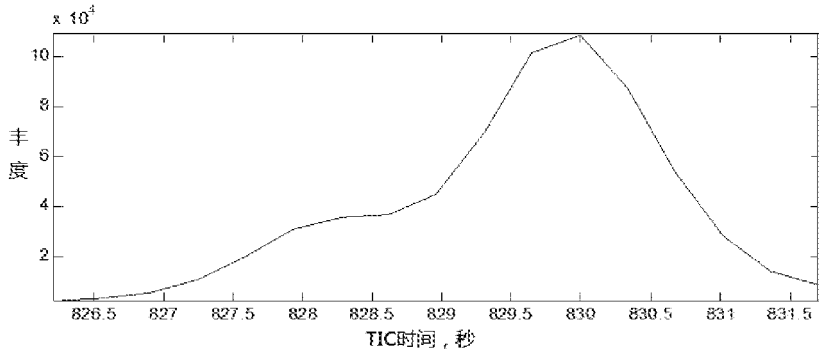


图 14-2

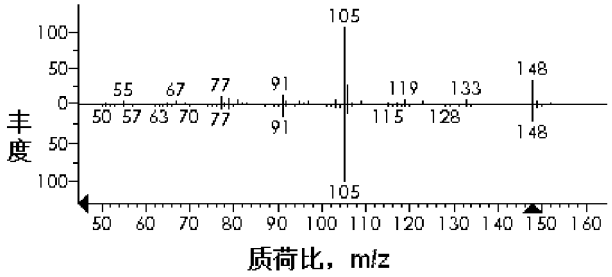


图 15

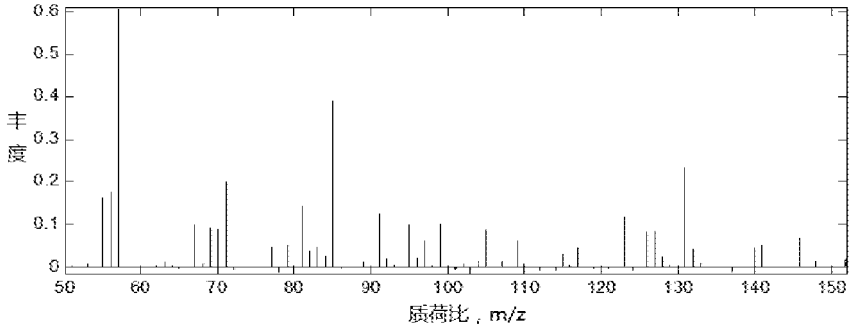


图 16-1

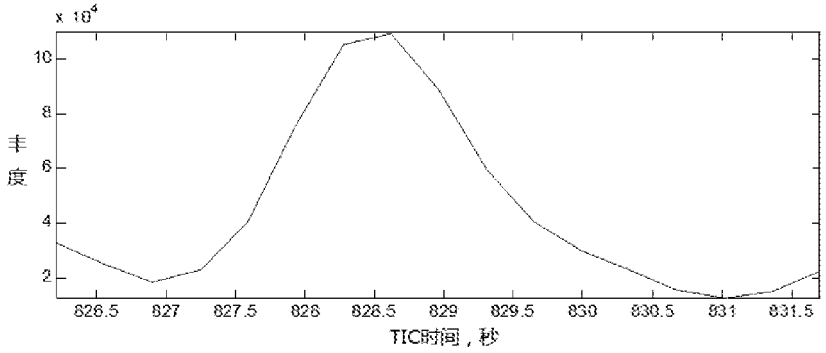


图 16-2

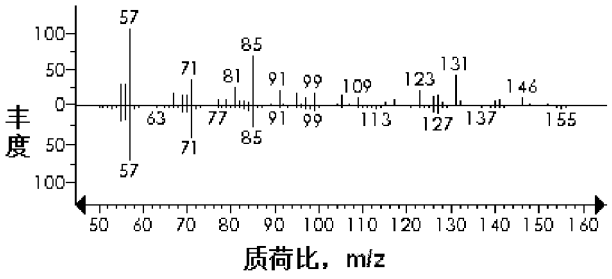


图 17

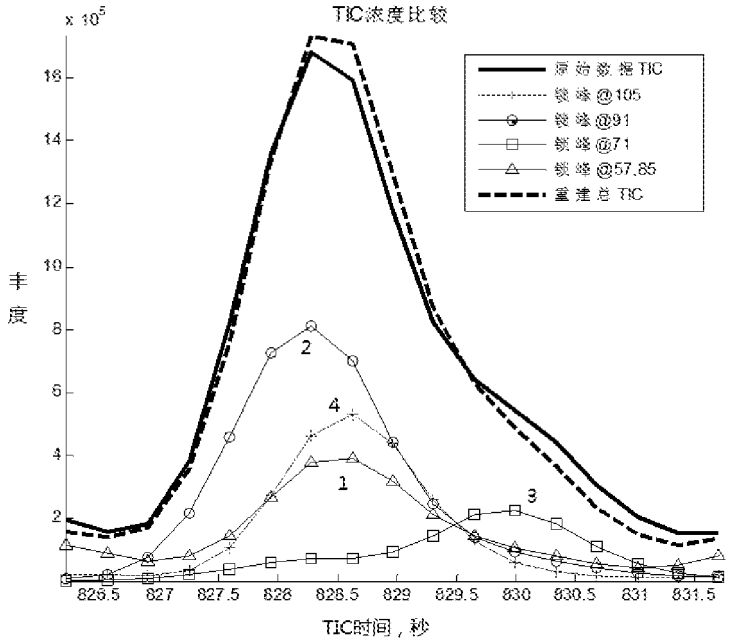

TIC浓度比较
x 10^5
丰度
TIC时间，秒
原始数据TIC
峰@105
峰@91
峰@71
峰@57.85
重建总TIC
1
2
3
4

图 18

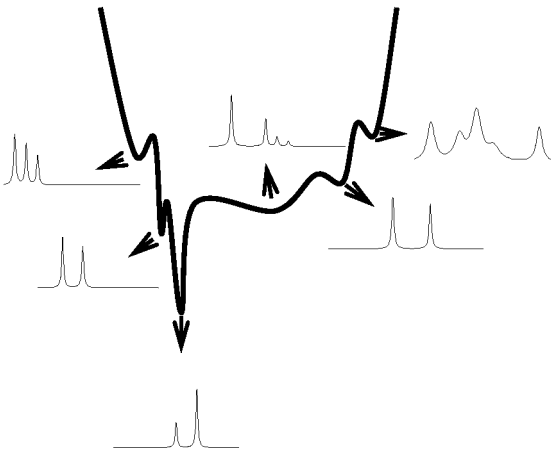


图 19