# Article information:

A tutorial in small molecule identification via electrospray ionization-mass spectrometry: The practical art of structural elucidation - PubMed  
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/29120505/>

# Article summary:

1. 本文是一篇关于通过电喷雾电离质谱法（electrospray ionization-mass spectrometry）进行小分子鉴定的教程，重点介绍了结构解析的实际技巧。

2. 文章讨论了基于质谱和质谱/质谱光谱的解释基础，以识别小分子分析物。同时还讨论了其他大气压电离方法如大气压化学/光电离的应用。

3. 文章主要关注个体未知化合物的质谱结构解析的基本步骤，而不是复杂样品中大规模鉴定的策略。此外，文章还讨论了获得有用正交信息（UV/Vis、H/D交换、化学衍生等）的策略，并提供了用于小分子结构解析的不同信息学工具和方法的概述。

# Article rating:

Appears moderately imbalanced: The article provides some useful information, but is missing several important points or pieces of evidence that would be required to present the discussed topics in a balanced and reliable way. You are encouraged to seek a more balanced perspective on the presented issues by exploring the provided research topics and looking at different information sources.

# Article analysis:

这篇文章是一篇关于通过电喷雾电离质谱法（ESI-MS）进行小分子鉴定的教程。文章介绍了解释基于ESI-MS和MS/MS光谱以识别小分子分析物的基本原理。文章重点讨论了质子化和去质子化离子（[M + H]+和[M - H]-）以及其他加合物离子的检测，分子式的确定，以及对产物离子光谱的解释等方面。此外，文章还讨论了获取有用的正交信息（UV/Vis、H/D交换、化学衍生等）的策略，并提供了可以用于小分子结构阐明的不同信息学工具和方法的概述。

然而，这篇文章存在一些潜在偏见和片面报道。首先，文章只关注个体未知化合物的结构阐明，而没有描述复杂样品中大规模鉴定的策略。这可能导致读者对如何处理复杂样品中未知化合物鉴定问题感到困惑。

其次，虽然文章提到了获取正交信息的策略，但并没有详细说明如何使用这些信息来辅助结构阐明。缺乏实际案例或示例使得读者难以理解如何将这些策略应用于实际问题中。

此外，文章没有提供足够的证据来支持其所提出的主张。例如，在讨论分子式确定时，文章没有说明如何通过质谱数据来推断分子式，并且没有提供任何实例来说明这一点。

最后，文章没有探索可能的反驳观点或风险。它只关注了结构阐明的基本步骤，而忽略了可能存在的挑战和限制。这可能导致读者对使用ESI-MS进行小分子鉴定时面临的困难和风险缺乏全面的认识。

综上所述，尽管这篇文章提供了关于使用ESI-MS进行小分子鉴定的基本知识，但它存在一些潜在偏见和不足之处。读者需要谨慎对待其中的信息，并进一步研究以获得更全面和准确的理解。

# Topics for further research:

* Strategies for identifying unknown compounds in complex samples
* Application of orthogonal information in structure elucidation
* Inference of molecular formula from mass spectrometry data
* Challenges and limitations in using ESI-MS for small molecule identification
* Case studies/examples illustrating the use of orthogonal information in structure elucidation
* Critique of the potential biases and limitations in the article

# Report location:

<https://www.fullpicture.app/item/3efb2e54352f6be584f54ac1d5928707>