



Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation

Количественный анализ

**Руководство по
ознакомлению**



Agilent Technologies

Примечания

© Agilent Technologies, Inc. 2017

Согласно законам США и международным законам об авторском праве запрещается воспроизведение любой части данного руководства в любой форме и любым способом (включая сохранение на электронных носителях, извлечение или перевод на иностранный язык) без предварительного письменного разрешения компании Agilent Technologies, Inc.

Номер руководства по каталогу

G3335-98152

Издание

Сентябрь 2017 г.

Напечатано в США

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA USA 95051

Версия ПО

Это руководство действительно для программы Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation — Количественный анализ версии не ниже B.07.xx до тех пор, пока не будет заменено.

Если у вас есть замечания по данному руководству, отправьте их электронной почтой по адресу:

feedback_lcms@agilent.com.

Гарантия

Материал представлен в документе «как есть» и может быть изменен в последующих изданиях без уведомления. Кроме того, в пределах, допустимых действующим законодательством, компания Agilent отказывается от всех явных или подразумеваемых гарантийных обязательств в отношении данного руководства и любой содержащейся в нем информации, в том числе от подразумеваемой гарантии товарной пригодности и гарантии пригодности для конкретной цели. Компания Agilent не несет ответственности за ошибки, случайные или косвенные убытки, связанные с поставкой и эффективным применением на практике данного документа и любой содержащейся в нем информации. Если между компанией Agilent и пользователем подписано отдельное соглашение, условия гарантии которого не соответствуют условиям гарантий, содержащимся в данном документе, то силу имеют условия отдельного соглашения.

Технологические лицензии

Аппаратура и (или) программное обеспечение, описанные в данном документе, поставляются по лицензии и могут использоваться или копироваться только в соответствии с условиями лицензии.

Ограничение прав

Ограничение прав Правительства США. Права на программное обеспечение и технические данные, предоставляемые федеральному правительству, включают только права, передаваемые в обычном порядке конечным пользователям. Agilent предоставляет стандартную коммерческую лицензию на программное обеспечение и технические данные в соответствии с FAR 12.211 (технические данные) и 12.212 (компьютерное программное обеспечение), а для Министерства обороны США — согласно DFARS 252.227-7015 (технические данные — коммерческие элементы) и DFARS 227.7202-3 (права, касающиеся коммерческого программного обеспечения или документации по компьютерному программному обеспечению).

Предупреждающие сообщения

ВНИМАНИЕ!

Сообщение **ВНИМАНИЕ** указывает на опасность. Это сообщение привлекает внимание к процедурам и приемам работы, несоблюдение или неправильное выполнение которых может привести к повреждению прибора или потере важных данных. Если в документе встречается сообщение **ВНИМАНИЕ**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью выяснены и выполнены.

ОСТОРОЖНО!

Сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ** указывает на опасность. Данное сообщение предназначено для привлечения внимания к процедуре, методике и т. п., которые при неправильном выполнении или несоблюдении рекомендаций могут привести к травме или смерти. Если в документе встречается сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью выяснены и выполнены.

В данном руководстве...

Руководство по ознакомлению содержит упражнения с пошаговыми инструкциями, которые помогут научиться пользоваться программой Quantitative Analysis. Эти упражнения можно выполнять с демонстрационными сериями DrugsOfAbuse и LC-QTOF Pesticide, входящими в комплект поставки системы в папке **Data** установочного носителя, или с данными, полученными пользователем.

1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

В этом упражнении выполняется отладка таблицы серии, метода количественного анализа и целевых соединений с помощью полученных файлов данных, а также выполняются анализ серии и сохранение результатов. Эта глава применима к системе ЖХ-МС Agilent Triple Quad серии 6400 и системе ГХ-МС Agilent Triple Quad серии 7000.

2 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

В этом упражнении выполняется отладка таблицы серии, метода количественного анализа и целевого соединения с помощью полученных файлов данных, а также выполняются анализ серии и сохранение результатов.

3 Просмотр результатов количественного анализа

В этом упражнении выполняется просмотр данных пробы и соединений в файле серии, отладка макетов и экспорт результатов серии в файл Microsoft Excel.

4 Использование инструментов для оценки результатов

Инструменты, используемые в этом упражнении, облегчают оценку и получение более точных результатов количественного анализа.

5 Работа с отчетами о количественном анализе

В этом упражнении формируются отчеты с помощью указанных шаблонов, затем отчеты просматриваются в приложении Microsoft Excel.

6 Справочная информация

В этом разделе дается обзор специальных функций программы Quantitative Analysis.

Выбор значков рабочего стола для приложения Quantitative Analysis

Приложение количественного анализа Quantitative Analysis B.09.00 предлагает значки рабочего стола для **Классического** пользовательского интерфейса и пользовательского интерфейса **Quant-My-Way**.

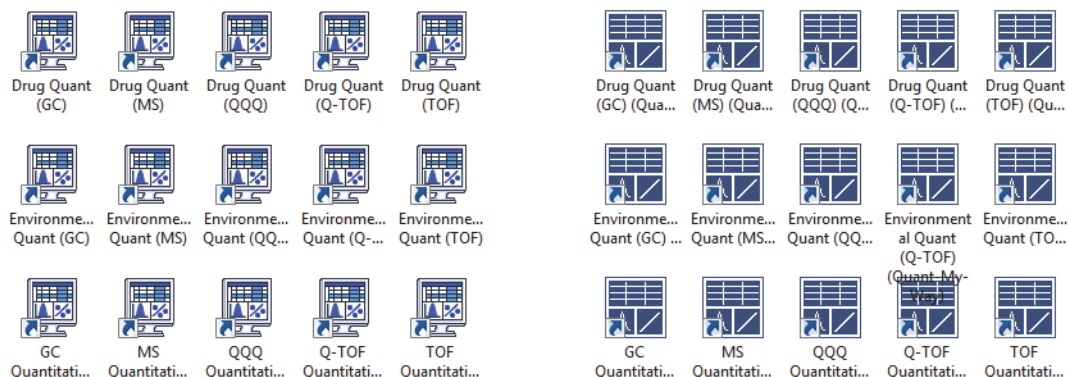
Классический пользовательский интерфейс выглядит схоже с пользовательским интерфейсом программы Quantitative Analysis версии B.08.00, инструменты и параметры располагаются в строке меню. Пользовательский интерфейс **Quant-My-Way** имеет современную ленту, при этом инструменты и параметры расположены во вкладках и лентах, а не в строке меню.

Можно выбрать установку значков рабочего стола **Классического** пользовательского интерфейса, пользовательского интерфейса **Quant-My-Way** или комбинированный вариант.

В зависимости от способа установки программы Quantitative Analysis на рабочем столе могут находиться разные значки, означающие разные типы приборов. При запуске программы Quantitative Analysis с помощью этих значков происходит установка значений по умолчанию и некоторых функций в соответствии с выбранным типом прибора.

Щелкнув любой из этих значков, можно увидеть полное имя установленной программы. Убедитесь, что выбираемый значок соответствует типу данных, которые нужно проанализировать.

В данном *Ознакомительном руководстве* рассматривается **Классический** пользовательский интерфейс. Однако в него включены отличающиеся элементы пользовательского интерфейса **Quant-My-Way**, они выделены синим.



Перед тем как приступить к выполнению упражнений

Убедитесь, что файлы данных, которые будут использоваться после завершения упражнения с данным документом, находятся в компьютере.

- Если было установлено дополнительное программное обеспечение MassHunter Quantitative Analysis, то необходимые для этих упражнений файлы данных должны находиться в папке **MassHunter/Data/QuantExamples**.
- Если не было установлено дополнительное программное обеспечение MassHunter Quantitative Analysis, то можно скопировать данные с установочного носителя (**Supplemental/MassHunter/ Data/QuantExamples**) в любую папку компьютера.

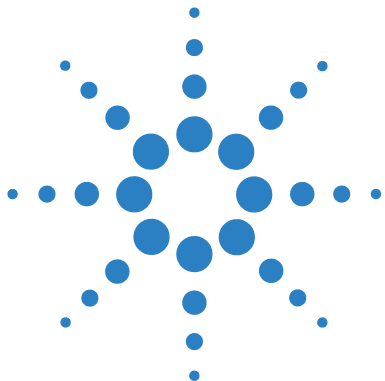
Введение

Упражнение 1	Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM	9
	Задание 1. Отладка новой серии	11
	Задание 2. Отладка нового метода для серии	14
	Задание 3. Отладка целевых соединений	17
	Задание 4. Отладка количественного анализа	20
	Задание 5. Установка интегратора	26
	Задание 6. Анализ и сохранение метода	28
Упражнение 2	Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF	29
	Задание 1. Отладка новой серии	31
	Задание 2. Отладка нового метода для серии	34
	Задание 3. Отладка целевых соединений	38
	Задание 4. Отладка количественного анализа	39
	Задание 5. Анализ и сохранение метода	41
Упражнение 3	Просмотр результатов количественного анализа	43
	Задание 1. Переход к результатам таблицы серии	44
	Задание 2. Изменение макетов окна результатов	48
	Задание 3. Экспорт и печать результатов	56
Упражнение 4	Использование трех инструментов для оценки результатов	59
	Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой	60
	Задание 2. Непараметрическое интегрирование	63
	Задание 3. Обнаружение выбросов	78
Упражнение 5	Формирование отчетов о количественном анализе	83

Введение

Справочная информация 89

Десять главных возможностей	90
Методы количественного анализа	94
Непараметрический интегратор	95
Краткий обзор серии: результаты	97
Краткий обзор соединений	98
Подтверждение соединения	100
Калибровка соединения	101



Упражнение 1

Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

Задание 1. Отладка новой серии	11
Задание 2. Отладка нового метода для серии	14
Задание 3. Отладка целевых соединений	17
Задание 4. Отладка количественного анализа	20
Задание 5. Установка интегратора	26
Задание 6. Анализ и сохранение метода	28

В этом упражнении выполняется отладка метода количественного анализа для серии полученных файлов данных. Упражнение выполняется с файлами данных **DrugsOfAbuse** (см. «[Перед тем как приступить к выполнению упражнений](#)» на стр. 5) и обучает выполнению следующих задач:

- Отладка таблицы серии, содержащей файлы данных неизвестных проб и калибровки для наркотических препаратов: амфетамина, кокаина, метамфетамина и MDMA.
- Отладка нового метода количественного анализа на основе калибровочного стандарта наибольшей концентрации.
- Отладка целевого соединения.
 - Просмотр переходов MRM и хроматографических параметров для соединений в файле данных.
 - Отладка внутреннего стандарта для каждого из соединений.
- Отладка количественного анализа для метода.
 - Создание уровней из калибровочных образцов.
 - Отладка ионов-квалификаторов и калибровочной кривой.
- Количественный анализ серии и сохранение результатов.



Каждое упражнение представлено в виде таблицы, состоящей из трех столбцов:

- Шаги — следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции — используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения. В данном *Ознакомительном руководстве* рассматривается **Классический** пользовательский интерфейс. Однако в него включены отличающиеся элементы пользовательского интерфейса **Quant-My-Way**, они выделены синим.
- Комментарии — здесь представлены советы и дополнительная информация о каждом этапе упражнения.

Задание 1. Отладка новой серии

В этой задаче задается таблица серии, содержащая файлы данных для трех неизвестных проб и нескольких калибровочных проб наркотических препаратов: амфетамина, кокаина, метамфетамина и MDMA.

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Создайте новую серию для включения в нее проб. - Выберите все файлы данных из папки DrugsOfAbuse. - Присвойте файлу серии имя iii_test_01, где буквы «iii» — это Ваши инициалы.	а Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок Количественный анализ (QQQ) на рабочем столе.  Если программа используется впервые, появится используемый по умолчанию макет, показанный на Рис. 1.	- Эту программу также можно запустить, выбрав Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ) в меню Пуск. - При работе с данными QQQ доступны другие функции.

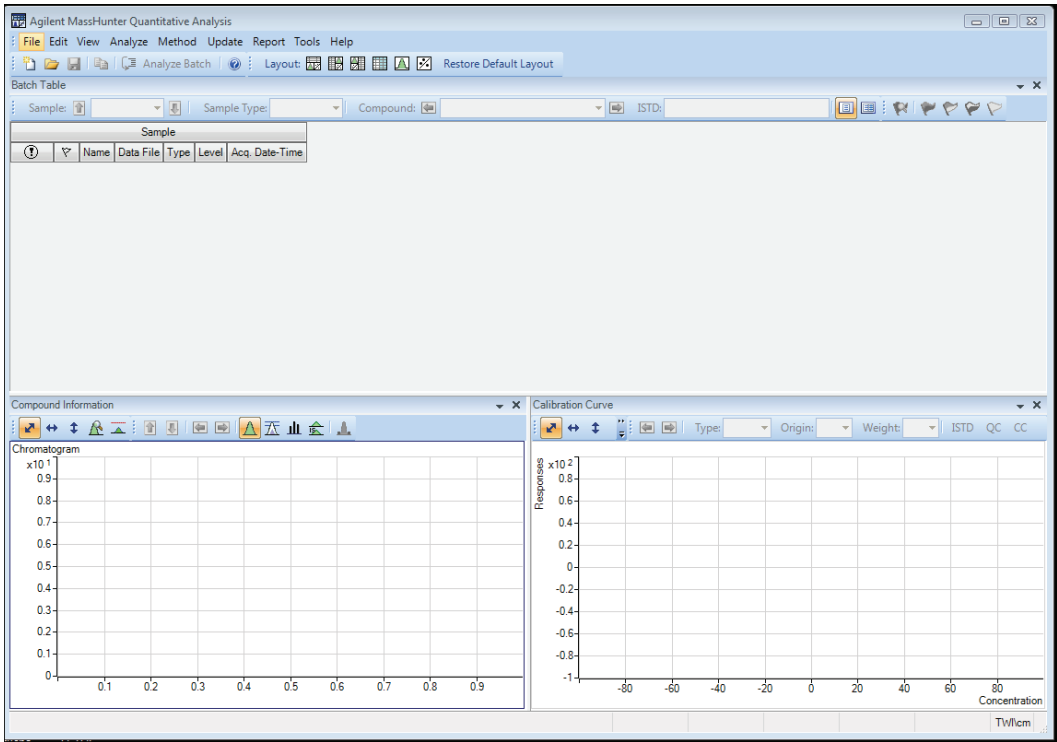


Рис. 1 Макет по умолчанию

1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

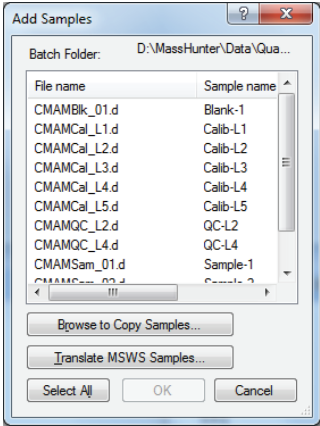
Задание 1. Отладка новой серии

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	b Выберите Файл > Новая серия. Откроется диалоговое окно Новая серия. c Перейдите в папку \Ваш каталог \DrugsOfAbuse\. d Введите имя файла серии iii_Test_01 и нажмите кнопку Создать.	- Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем создавать новую серию. Restore Default Layout - В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.

2 Добавьте все пробы из папки **DrugsOfAbuse** в серию.

- Все пробы должны быть выбраны. нажмите кнопку **ОК**, чтобы добавить их в серию.
- Таблица серии** заполнится. Теперь она содержит калибровочные, контрольные и неизвестные пробы. См. **Рис. 2**.

- Обратите внимание на то, что три файла содержат неизвестные пробы, один файл содержит холостую пробу, пять файлов содержат калибровочные пробы с различными уровнями калибровки, и два файла содержат пробы для контроля качества.



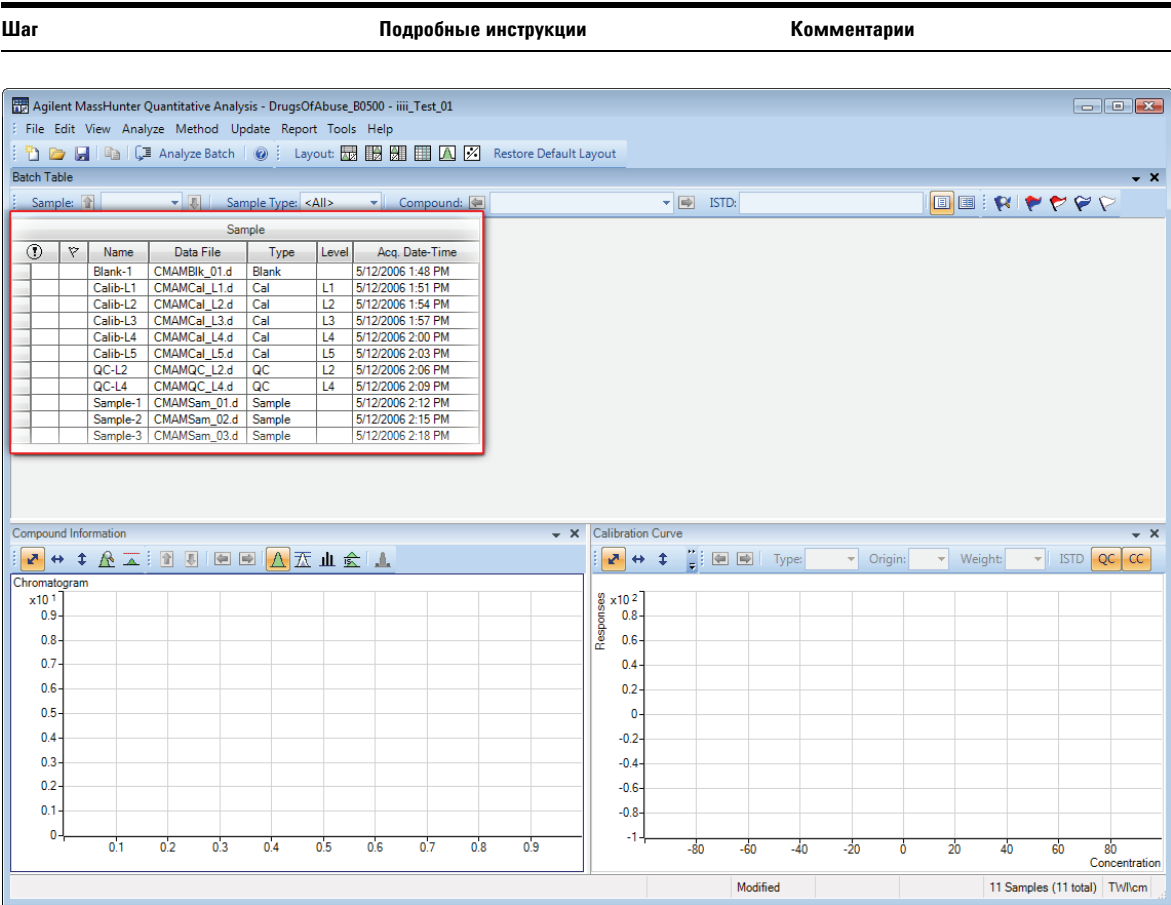


Рис. 2 Таблица серии, содержащая пробы наркотических препаратов (до выполнения количественного анализа)

Задание 2. Отладка нового метода для серии

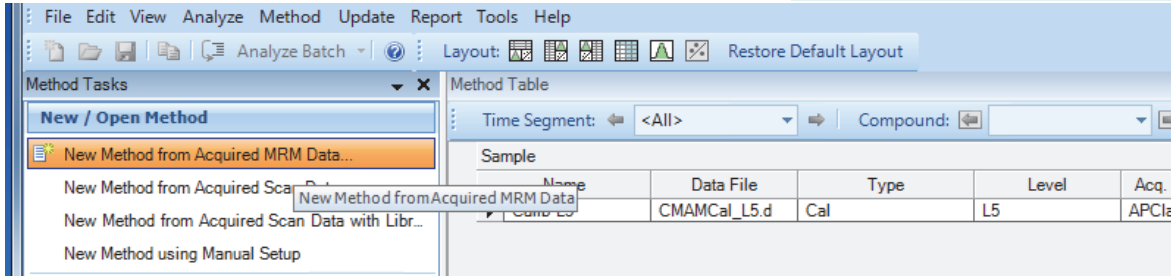
Эта задача показывает, как задавать новый метод количественного анализа на основе файла данных калибровки с наивысшей концентрацией пробы.

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
Создайте новый метод из полученных данных MRM.	a С помощью курсора выделите калибровочный стандарт с наибольшим уровнем концентрации, как показано на рисунке внизу.	Использование пробы с интенсивными сигналами соединений, например калибровочной пробы с высокой концентрацией, позволяет программе создать метод с надлежащими временами удерживания и соотношениями квалификаторов.

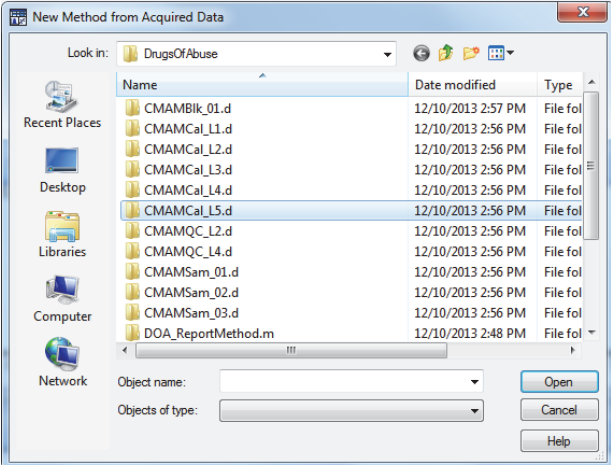
Agilent MassHunter Quantitative Analysis - Drug					
File Edit View Analyze Method Update Rep					
Analyze Batch Layout					
Batch Table					
Sample: Sample Type: <All>					
Sample					
		Name	Type	Level	Acq. Date-Time
		Blank	Blan		5/12/2006 1:48
		Calib-	Cal	L1	5/12/2006 1:51
		Calib-	Cal	L2	5/12/2006 1:54
		Calib-	Cal	L3	5/12/2006 1:57
		Calib-	Cal	L4	5/12/2006 2:00
		Calib-	Cal	L5	5/12/2006 2:03
		QC-L	QC	L2	5/12/2006 2:06
		QC-L	QC	L4	5/12/2006 2:09
		Samp	Sam		5/12/2006 2:12
		Samp	Sam		5/12/2006 2:15
		Samp	Sam		5/12/2006 2:18

1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM
Задание 2. Отладка нового метода для серии

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	с В столбце Задачи метода на боковой панели слева от панели Таблица метода выберите Создать/открыть метод > Новый метод из полученных данных MRM.	• Можно также выбрать Метод > Создать > Новый метод из полученных данных MRM. • В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод выберите Создать > Новый метод из полученных данных MRM.



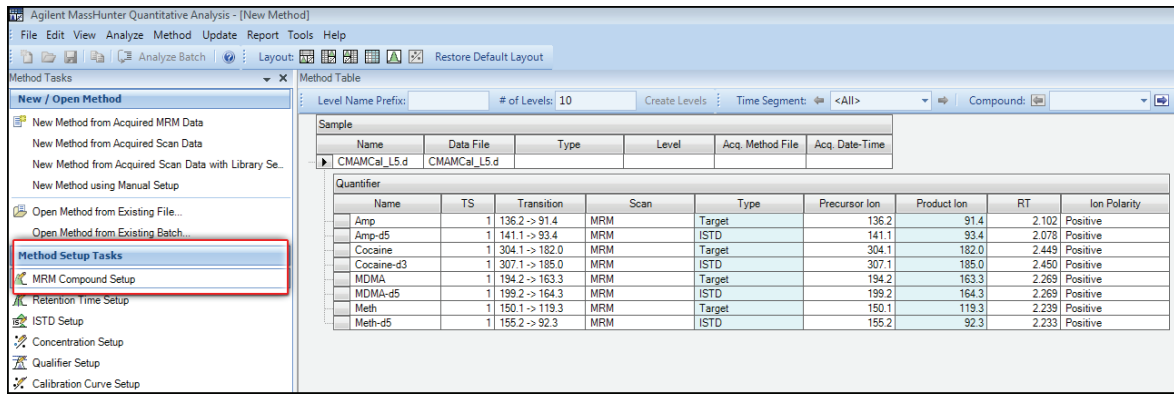
- d Выберите **Нет** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?** Система выведет на экран диалоговое окно **Новый метод из полученных данных**.
- e Щелкните ячейку **CMAMCal_L5.d** и нажмите кнопку **Открыть**, чтобы импортировать сведения о методе сбора данных.



Задание 3. Отладка целевых соединений

С помощью этой задачи вы научитесь проверять переходы MRM и данные ВУ для нового метода количественного анализа, которые можно изменять для отдельных целевых соединений. Вы также научитесь задавать соединение внутреннего стандарта для каждого целевого соединения.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	Проверьте на предмет переходов MRM новый метод количественного анализа, созданный из импортированного метода сбора данных.	
	а На боковой панели Задачи метода слева от окна Таблица метода выберите Задачи отладки метода > Отладка соединения MRM .	• В метод сбора данных будут введены названия соединений, связанных с переходами MRM. По умолчанию самый сильный сигнал выбирается в качестве иона-квантификатора.



1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM
Задание 3. Отладка целевых соединений

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

- б Чтобы проверить импортированные данные по времени удерживания, выберите **Задачи отладки метода > Отладка времени удерживания.**

- Для отдельных соединений можно изменять поля данных, выделенные синим цветом.

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	2.102	1.000	1.000	Minutes
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	2.078	1.000	1.000	Minutes
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	2.449	1.000	1.000	Minutes
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	2.450	1.000	1.000	Minutes
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	2.269	1.000	1.000	Minutes
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	2.269	1.000	1.000	Minutes
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	2.239	1.000	1.000	Minutes
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	2.233	1.000	1.000	Minutes

- 2 Задайте соединения внутреннего стандарта.

- Для каждого целевого соединения назначьте в качестве внутреннего стандарта (ISTD) соответствующее дейтерированное соединение.

- а Выберите **Задачи отладки метода > Отладка ISTD.**

- б В каждой строке целевого соединения щелкните раскрывающую стрелку в ячейке **Название соединения ISTD.**

- Не пытайтесь ввести название внутреннего стандарта в строке соединения внутреннего стандарта.

Name	TS	Transition	Scan	Type	ISTD Compound Name	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Amp-d5	☒		☐
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<None>	☒		☐
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	<None>	☒		☐
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<None>	☒		☐
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	<None>	☒		☐
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<None>	☒		☐
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	<None>	☒		☐
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<None>	☒		☐

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	с Щелкните название внутреннего стандарта, связанное с целевым соединением. d Введите концентрацию внутреннего стандарта (Конц. ISTD) для каждого соединения-внутреннего стандарта (в данном примере 50,0000).	

The screenshot shows the 'Method Table' and 'Quantifier' tables in the Agilent MassHunter Quantitative Analysis software. The 'Method Table' lists sample names and data files. The 'Quantifier' table lists compounds, their retention times, transitions, scan numbers, and ISTD concentrations. The 'ISTD Conc.' column is highlighted with a red box, showing values of 50.0000 for several compounds.

Name	TS	Transition	Scan	Type	ISTD Compound Name	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Amp-d5			
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<None>	✓	50.0000	
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	Cocaine-d3			
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<None>	✓	50.0000	
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	MDMA-d5			
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<None>	✓	50.0000	
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	Meth-d5			
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<None>	✓	50.0000	

Задание 4. Отладка количественного анализа

Это задание содержит инструкции по отладке параметров количественного анализа для следующих составляющих метода:

- уровни калибровки;
- ионы-квалификаторы;
- аппроксимация калибровочных кривых.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Создайте пять уровней калибровки для первого соединения.	a В главном меню выберите Метод > Создать уровни из калибровочных проб. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод выберите Калибровочная кривая > Создать уровни из калибровочных проб. Для каждого квантификатора в окне Таблица метода откроется таблица Калибровка. b Для одного из квантификаторов замените используемые по умолчанию концентрации на фактическую концентрацию для каждого уровня. • L1 – 2,5000 • L2 – 5,0000 • L3 – 12,5000 • L4 – 25,0000 • L5 – 125,0000	

Method Tasks

New / Open Method

Method Setup Tasks

MRM Compound Setup

Retention Time Setup

ISTD Setup

Concentration Setup

Qualifier Setup

Calibration Curve Setup

Globals Setup

Save / Exit

Validate

Save

Save As...

Exit

Manual Setup Tasks

Outlier Setup Tasks

Advanced Tasks

Method Table

Time Segment: <All>

Compound: Amp

Reset Table View

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d				

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	Units	Dil. High Conc.
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	ng/ml	

Calibration

Level	Conc.	Response	Enable	Type	Cal. Path	Calibration STD Acquisition DateTime	Level Last Update Time	Level RSD	RF
L1	1.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		
L2	2.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		
L3	3.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		
L4	4.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		
L5	5.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		
L2	2.0000		☒	QC			6/17/2014 3:09 PM		
L4	4.0000		☒	QC			6/17/2014 3:09 PM		

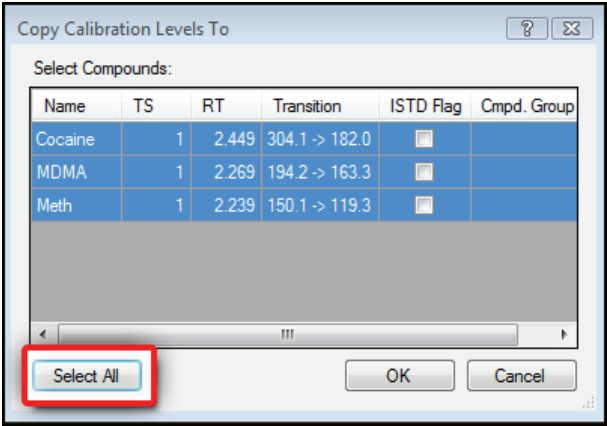
Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	Units	Dil. High Conc.
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	ng/ml	

Calibration

Level	Conc.	Response	Enable	Type	Cal. Path	Calibration STD Acquisition DateTime	Level Last Update Time	Level RSD	RF
L1	50.0000		☒	Calibration			6/17/2014 3:09 PM		

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Скопируйте уровни калибровки и концентрации в другие соединения.	а Выберите Метод > Копировать уровни калибровки в.... В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way щелкните правой кнопкой мыши по таблице Квантификатор и выберите Копировать уровни калибровки в... Откроется диалоговое окно Копировать уровни калибровки в. b Нажмите кнопку Выбрать все, затем нажмите кнопку OK.	



- с

Закройте окно **Сведения о соединении** и окно **Сведения о пробе** в нижней половине главного экрана количественного анализа.

1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM
Задание 4. Отладка количественного анализа

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

- d Перейдите в окно Таблица метода и сравните параметры концентрации для калибровки четырех целевых соединений — амфетамина, кокаина, метамфетамина и MDMA

Method Table

Time Segment: <All> Compound: Amp Reset Table View

Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
	CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d				

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	2.102	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	2.5000	
L2	5.0000	
L3	12.5000	
L4	25.0000	
L5	125.0000	

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Amp-d5	1	141.1						

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	50.0000	
L2	50.0000	
L3	50.0000	
L4	50.0000	
L5	50.0000	

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	2.449	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	2.5000	
L2	5.0000	
L3	12.5000	
L4	25.0000	
L5	125.0000	

Quantifier

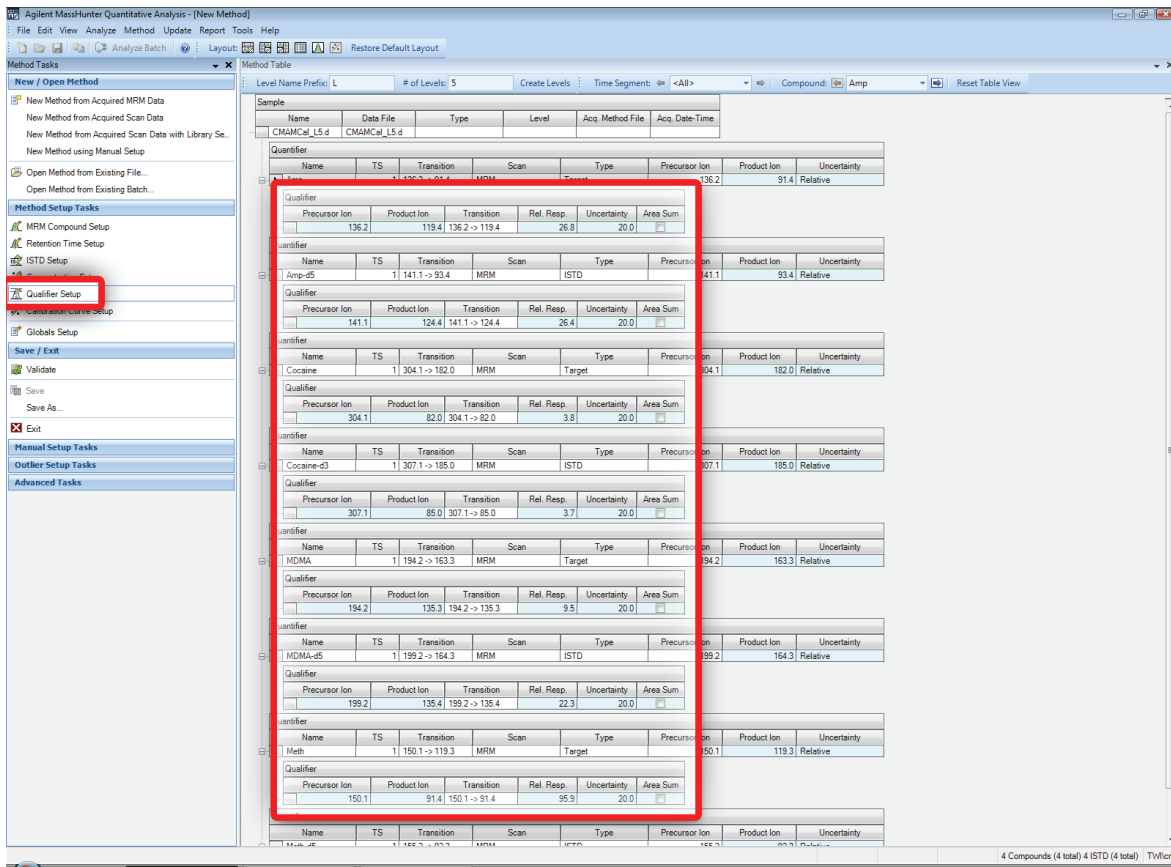
Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	2.450	1.000	1.000	Minutes

Calibration

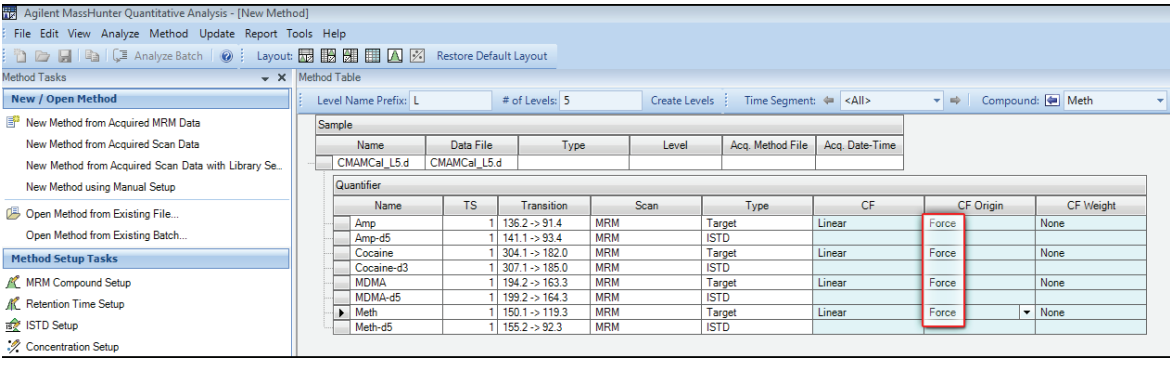
Level	Conc.	Response
L1	50.0000	
L2	50.0000	
L3	50.0000	
L4	50.0000	
L5	50.0000	

Эти уровни были скопированы в кокаин, MDMA и метамфетамин.

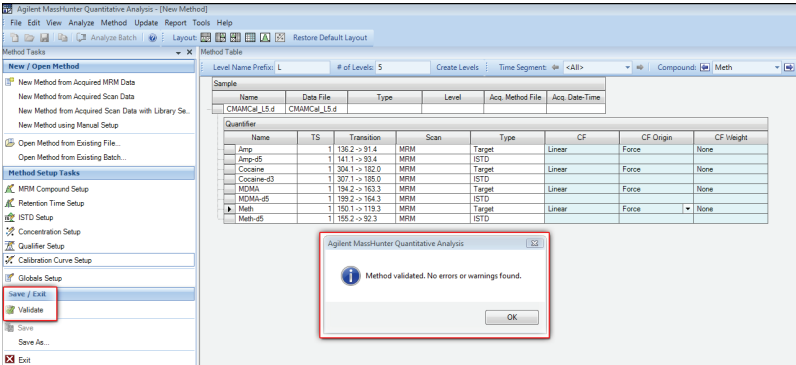
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Задайте ионы-квалификаторы и калибровочную кривую.	а В разделе Задачи отладки метода выберите Отладка квалификатора и проверьте параметры отладки квалификаторов.	- Система автоматически заполняет параметры отладки квалификаторов, когда импортирует сведения о сборе данных [MS]. - Помимо иона-квантификатора соединения во время создания метода в качестве ионов-квалификаторов назначаются дополнительные переходы MRM.



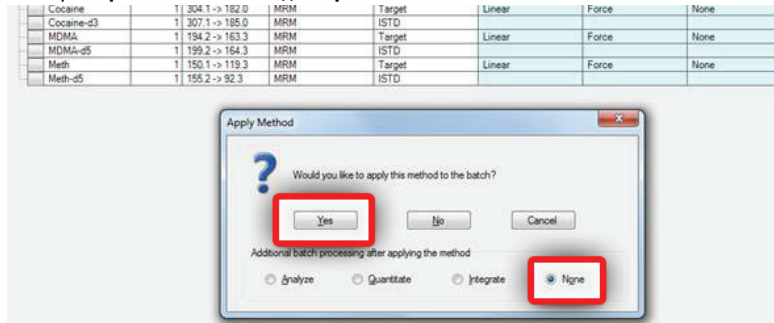
1 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM
Задание 4. Отладка количественного анализа

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии																																																																																															
	b В разделе Задачи отладки метода выберите Отладка калибровочной кривой. c Для каждого целевого соединения замените значение поля Начало координат АК на Принудительно.																																																																																																
 The screenshot shows the Agilent MassHunter Quantitative Analysis software interface. The 'Method Setup Tasks' pane on the left lists various tasks, including 'New / Open Method' and 'Method Setup Tasks'. The 'Method Table' pane on the right displays a table of quantifiers. The 'CF Origin' column for the 'Meth' and 'Meth-d5' rows is highlighted with a red box, indicating the 'Force' value. <table><tr><th>Sample</th><th>Name</th><th>Data File</th><th>Type</th><th>Level</th><th>Acq. Method File</th><th>Acq. Date-Time</th></tr><tr><td></td><td>CMAMCal_L5.d</td><td>CMAMCal_L5.d</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table> <table><tr><th>Quantifier</th><th>Name</th><th>TS</th><th>Transition</th><th>Scan</th><th>Type</th><th>CF</th><th>CF Origin</th><th>CF Weight</th></tr><tr><td></td><td>Amp</td><td>1</td><td>136.2 -> 91.4</td><td>MRM</td><td>Target</td><td>Linear</td><td>Force</td><td>None</td></tr><tr><td></td><td>Amp-d5</td><td>1</td><td>141.1 -> 93.4</td><td>MRM</td><td>ISTD</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td>Cocaine</td><td>1</td><td>304.1 -> 182.0</td><td>MRM</td><td>Target</td><td>Linear</td><td>Force</td><td>None</td></tr><tr><td></td><td>Cocaine-d3</td><td>1</td><td>307.1 -> 185.0</td><td>MRM</td><td>ISTD</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td>MDMA</td><td>1</td><td>194.2 -> 163.3</td><td>MRM</td><td>Target</td><td>Linear</td><td>Force</td><td>None</td></tr><tr><td></td><td>MDMA-d5</td><td>1</td><td>199.2 -> 164.3</td><td>MRM</td><td>ISTD</td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td>Meth</td><td>1</td><td>150.1 -> 119.3</td><td>MRM</td><td>Target</td><td>Linear</td><td>Force</td><td>None</td></tr><tr><td></td><td>Meth-d5</td><td>1</td><td>155.2 -> 92.3</td><td>MRM</td><td>ISTD</td><td></td><td></td><td></td></tr></table>			Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time		CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d					Quantifier	Name	TS	Transition	Scan	Type	CF	CF Origin	CF Weight		Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Linear	Force	None		Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD					Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	Linear	Force	None		Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD					MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	Linear	Force	None		MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD					Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	Linear	Force	None		Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD			
Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time																																																																																											
	CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d																																																																																															
Quantifier	Name	TS	Transition	Scan	Type	CF	CF Origin	CF Weight																																																																																									
	Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Linear	Force	None																																																																																									
	Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD																																																																																												
	Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	Linear	Force	None																																																																																									
	Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD																																																																																												
	MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	Linear	Force	None																																																																																									
	MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD																																																																																												
	Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	Linear	Force	None																																																																																									
	Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD																																																																																												

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4 Проверьте метод.	а В разделе Сохранить/Выйти выберите Валидировать, чтобы проверить правильность отладки метода.	• Внизу экрана можно увидеть все ошибки, выявленные во время валидации.

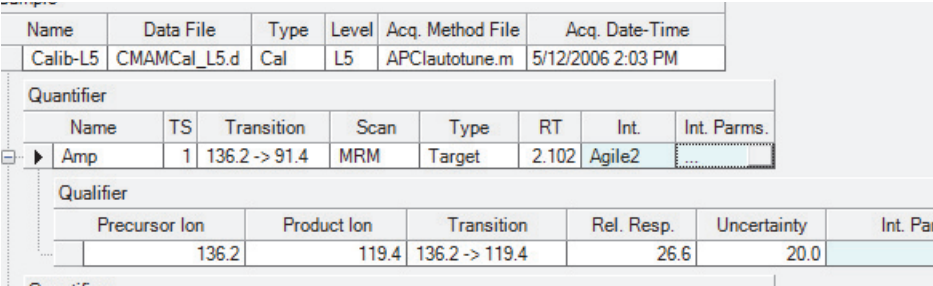


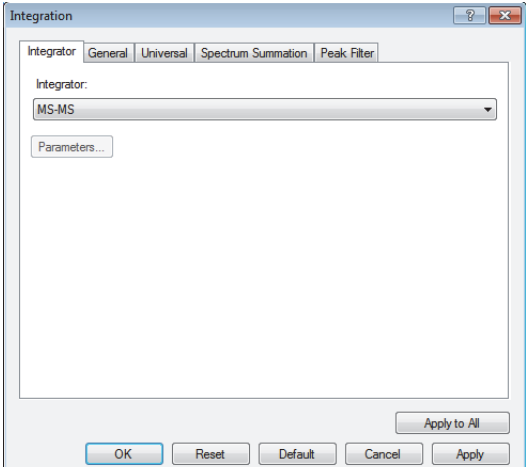
- б Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **ОК**.
- в Выберите **Сохранить/Выйти > Выход**.
- г Выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**



Задание 5. Установка интегратора

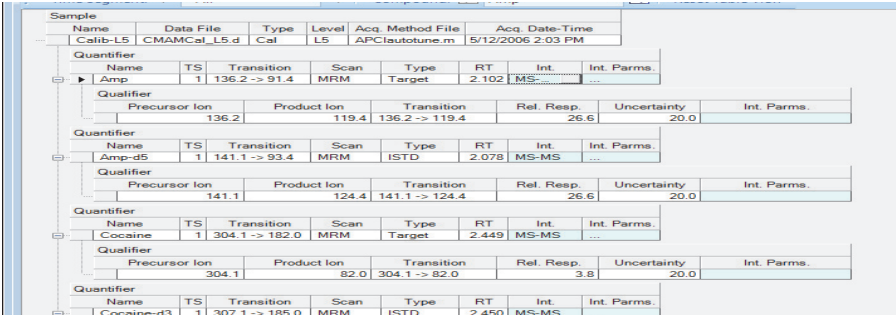
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	Замените используемый по умолчанию интегратор на MS-MS. a Выберите Метод > Правка или нажмите клавишу F10. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод щелкните Правка. b Выберите Метод > Дополнительные задачи > Отладка параметров интегрирования. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод выберите Дополнительные задачи > Отладка параметров интегрирования. c В окне Таблица метода щелкните в поле, расположенном в правой части значения Инт.	Для программы MassHunter Quant рекомендуемым компанией Agilent интегратором по умолчанию является интегратор Agile2 без параметров. Данное задание меняет интегратор Agile2, заданный по умолчанию, на интегратор MS-MS, чтобы продемонстрировать процедуру смены интегратора для всех соединений в методе количественной обработки.
	d Выберите пункт MS-MS в раскрывающемся меню.	





Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
------	----------------------	-------------

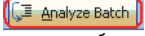
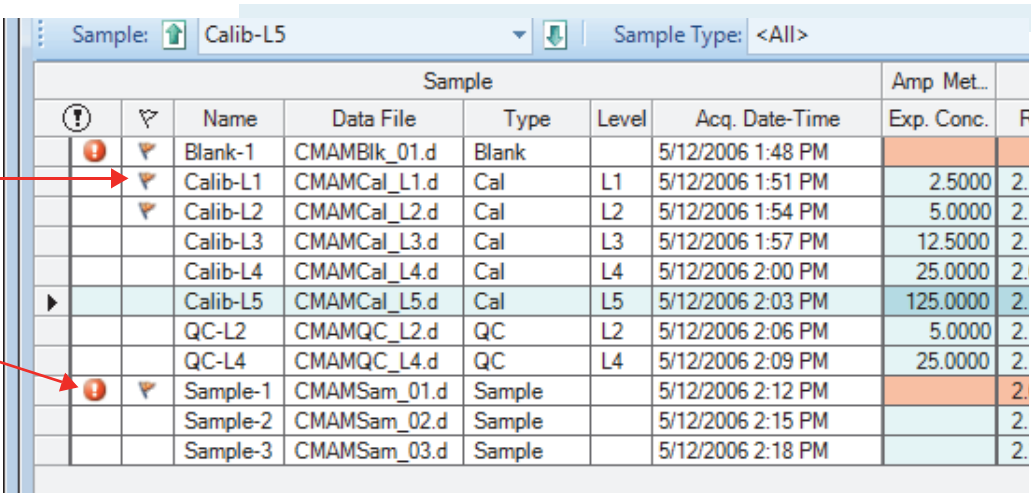
- e Нажмите кнопку **Применить ко всем**.
- f Нажмите **ОК**.



- 2 Сохраните метод.
- a В разделе **Сохранить/Выйти** нажмите кнопку **Выход**.
- b Выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

Задание 6. Анализ и сохранение метода

В этом упражнении выполняется количественный анализ серии и сохраняются результаты.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	Выполните анализ серии и проверьте результаты для каждого соединения. a Щелкните значок Анализировать серию  на панели инструментов, чтобы начать анализ серии. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Анализировать серию. b Наведите курсор на сообщение о количественном анализе пробы 1. c Наведите курсор на флаги для первых двух калибровочных стандартов.	- Обратите внимание на то, что в двух калибровочных стандартах содержатся данные о выбросах. - Обратите внимание на то, что в пробе 1 программа не нашла данных по амфетамину (Amp).
Сообщение о флагах выбросов Сообщение о количественном анализе 		
2	Сохраните серию. a Выберите Файл > Сохранить серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Сохранить серию. b Выберите Файл > Закреть серию, чтобы закрыть серию.	



Упражнение 2

Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 1. Отладка новой серии	31
Задание 2. Отладка нового метода для серии	34
Задание 3. Отладка целевых соединений	38
Задание 4. Отладка количественного анализа	39
Задание 5. Анализ и сохранение метода	41

В этом упражнении выполняется отладка количественного анализа серии полученных файлов данных Q-TOF. Упражнение выполняется с файлами данных **LC-QTOF Pesticide** на установочном носителе и обучает выполнению следующих задач:

- Отладка таблицы серии, содержащей файлы данных пробы и калибровки для растворителя.
- Отладка нового метода количественного анализа на основе калибровочного стандарта наибольшей концентрации.
- Отладка целевого соединения.
 - Просмотр дочернего иона и хроматографических параметров для соединения растворителя в файле данных.
- Отладка количественного анализа для метода.
 - Создание уровней из калибровочных образцов.
 - Отладка ионов-квалификаторов и калибровочной кривой.
- Количественный анализ серии и сохранение результатов.



Каждое упражнение представлено в виде таблицы, состоящей из трех столбцов:

- Шаги — следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции — используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения.
- Комментарии — здесь представлены советы и дополнительная информация о каждом этапе упражнения.

Вводные сведения...

Скопируйте папку **LC-QTOF Pesticide** из папки **Supplemental/Data/Quant Examples/Q-TOF** установочного носителя в папку системы. Если установлено дополнительное программное обеспечение MassHunter Quantitative Analysis, то необходимые для этих упражнений файлы данных должны находиться в папке **MassHunter/Data/QuantExamples**.

Задание 1. Отладка новой серии

Это задание посвящено отладке таблицы серии, содержащей файлы данных для калибровочных образцов растворителя. Многие задачи этого раздела аналогичны заданиям в упражнении 1.

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Создайте новую серию для включения в нее проб. - Выберите все файлы данных из папки LC-QTOF Pesticide. - Присвойте файлу серии имя iii_test_01, где «iii» — это Ваши инициалы.	а Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок Количественный анализ (Q-TOF) на рабочем столе.  Если программа используется впервые, появится используемый по умолчанию макет, показанный на Рис. 4 .	Эту программу также можно запустить, выбрав Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (Q-TOF) в меню Пуск.

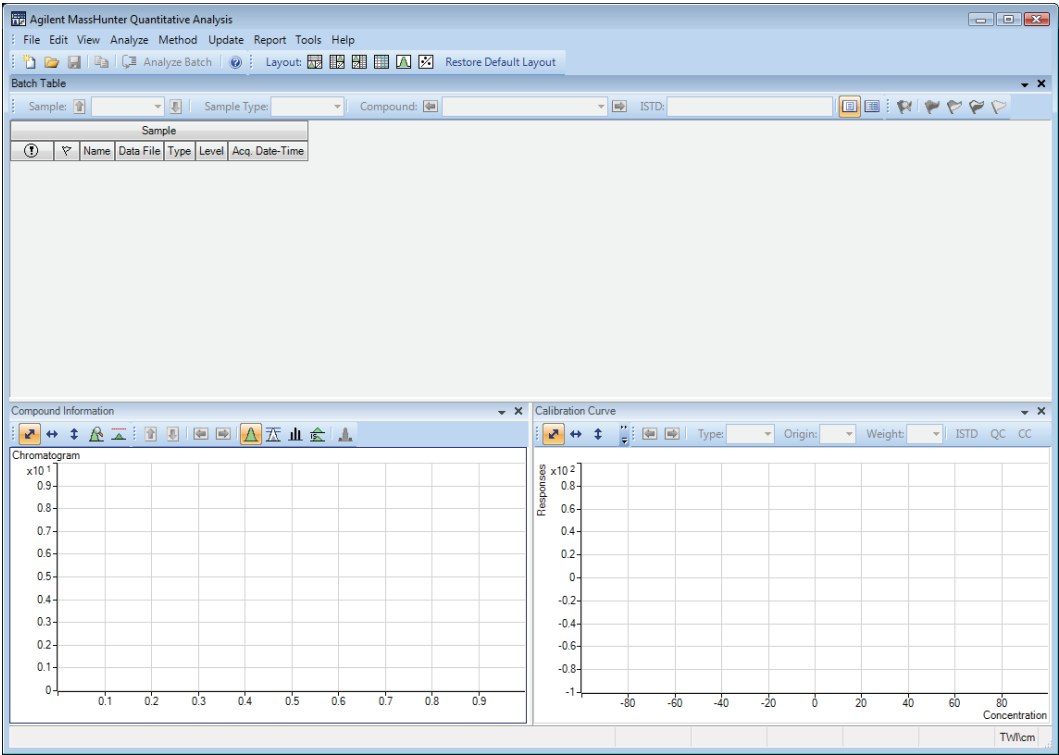
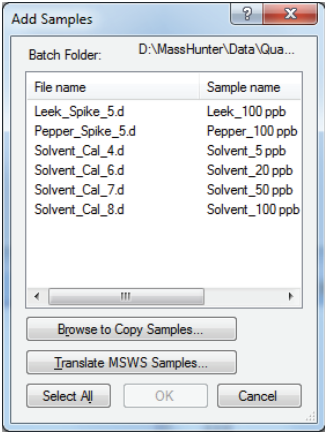


Рис. 4 Макет по умолчанию

2 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 1. Отладка новой серии

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	b Выберите Файл > Новая серия. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Новая серия. Откроется диалоговое окно Новая серия. c Перейдите в папку \Ваш каталог LC-QTOF Pesticide\. d Введите имя файла серии iii_Test_01 и нажмите кнопку Создать.	- Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем создавать новую серию. Restore Default Layout - В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.
2 Добавьте все пробы из папки LC-QTOF Pesticide в серию.	Откроется диалоговое окно Добавить пробы. Все пробы должны быть выбраны. нажмите кнопку ОК, чтобы добавить их в серию. Таблица серии заполнится. Теперь она содержит пробы. См. Рис. 5.	Обратите внимание на то, что калибровочных проб четыре.



War

Подобранные инструкции

Комментарии

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch

Layout

Restore Default Layout

Batch Table

Sample:

Sample Type: <All>

Compound:

ISTD:

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Cal	1	4/14/2011 8:53 PM
Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Cal	2	4/14/2011 9:26 PM
Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Cal	3	4/14/2011 9:43 PM
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	4/14/2011 9:59 PM
Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Sample		4/15/2011 9:45 PM
Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Sample		4/16/2011 5:28 AM

Compound Information

Chromatogram

Responses

Concentration

Calibration Curve

Type:

Origin:

Weight:

Modified

6 Samples (6 total)

TW/1cm

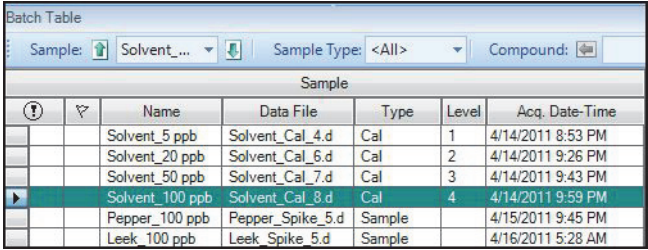
Рис. 5 Таблица серии, содержащая пробы (до выполнения количественного анализа)

Задание 2. Отладка нового метода для серии

Это задание показывает, как создавать новый метод количественного анализа на основе серий, содержащих файлы данных калибровочной пробы. В данном задании используется одна калибровочная проба, из которой получают данные, необходимые для добавления калибровочного соединения в метод.

Процедура, описанная в задании 2, выполняется вручную. Также в ПО MassHunter имеется автоматическая процедура, которая позволяет создать метод количественного анализа, добавляя большое количество калибровочных соединений за один раз при помощи полученных данных сканирования и поиска по библиотеке. При выполнении автоматической процедуры ПО MassHunter анализирует файл данных и на основании указанных параметров поиска идентификаторов определяет названия соединений, целевой ион, ионы-квалификаторы, соотношения и время удерживания. При этом такие сведения наряду с другими параметрами по умолчанию используются для заполнения исходных значений для метода количественного анализа. Автоматическая процедура значительно сокращает время, необходимое для создания метода.

К тому же, при помощи файлов CEF можно добавлять соединения, выявленные при качественном анализе данных, перемещая данные из программы Qual в программу Quant. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
• Создайте новый метод из полученных данных Q-TOF.	a С помощью курсора выделите калибровочный стандарт с наибольшим уровнем концентрации, как показано на рисунке внизу.	• Использование пробы с интенсивными сигналами соединений, например калибровочной пробы с высокой концентрацией, позволяет программе создать метод с надлежащими временами удерживания и соотношениями квалификаторов.
		

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	b Выберите Метод > Правка, чтобы переключить в режим редактирования метода. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод щелкните Правка. В левой части экрана отобразится столбец Задачи метода, как показано на Рис. 6.	- Обратите внимание на то, что на Рис. 6 показан используемый по умолчанию макет для редактирования метода. - Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем создавать новый метод. Restore Default Layout - В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.

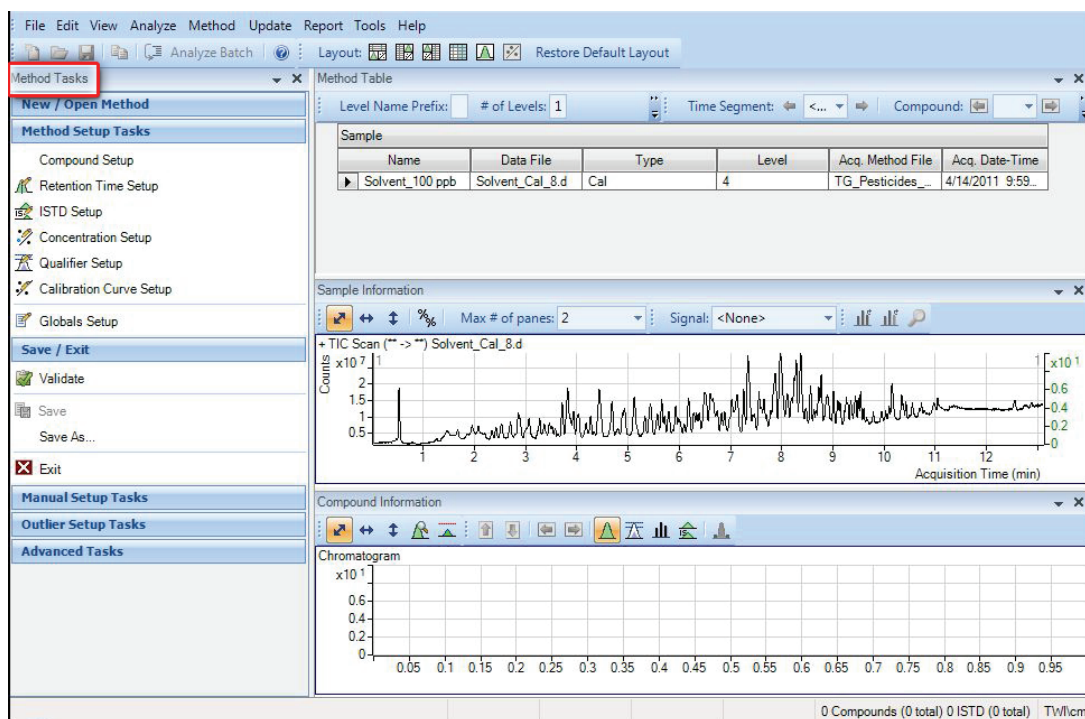
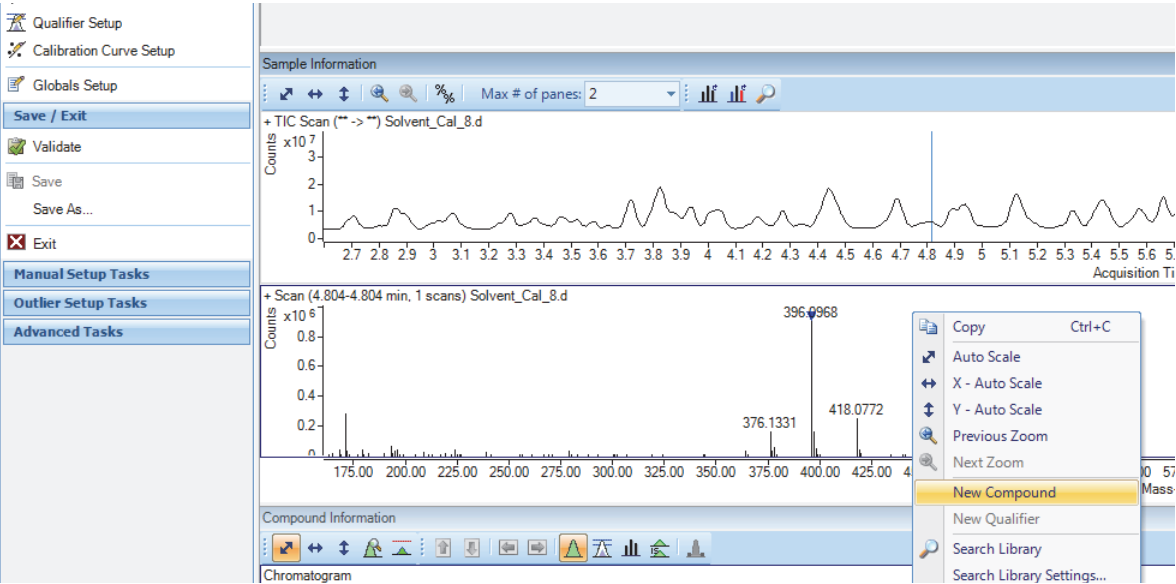


Рис. 6 Режим редактирования метода

2 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 2. Отладка нового метода для серии

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	c В окне Сведения о пробе щелкните пик посередине в районе отметки 4,82 на оси x. Щелкните правой кнопкой мыши и выберите Извлечь спектр. d Щелкните самый большой ион, 396,0966. Щелкните правой кнопкой мыши в этом месте и выберите Новое соединение.	• Чтобы точно выделить ион, удерживая правую кнопку мыши нажатой, наведите курсор на спектры и увеличьте область вокруг иона, который требуется выделить.
		

Шаг

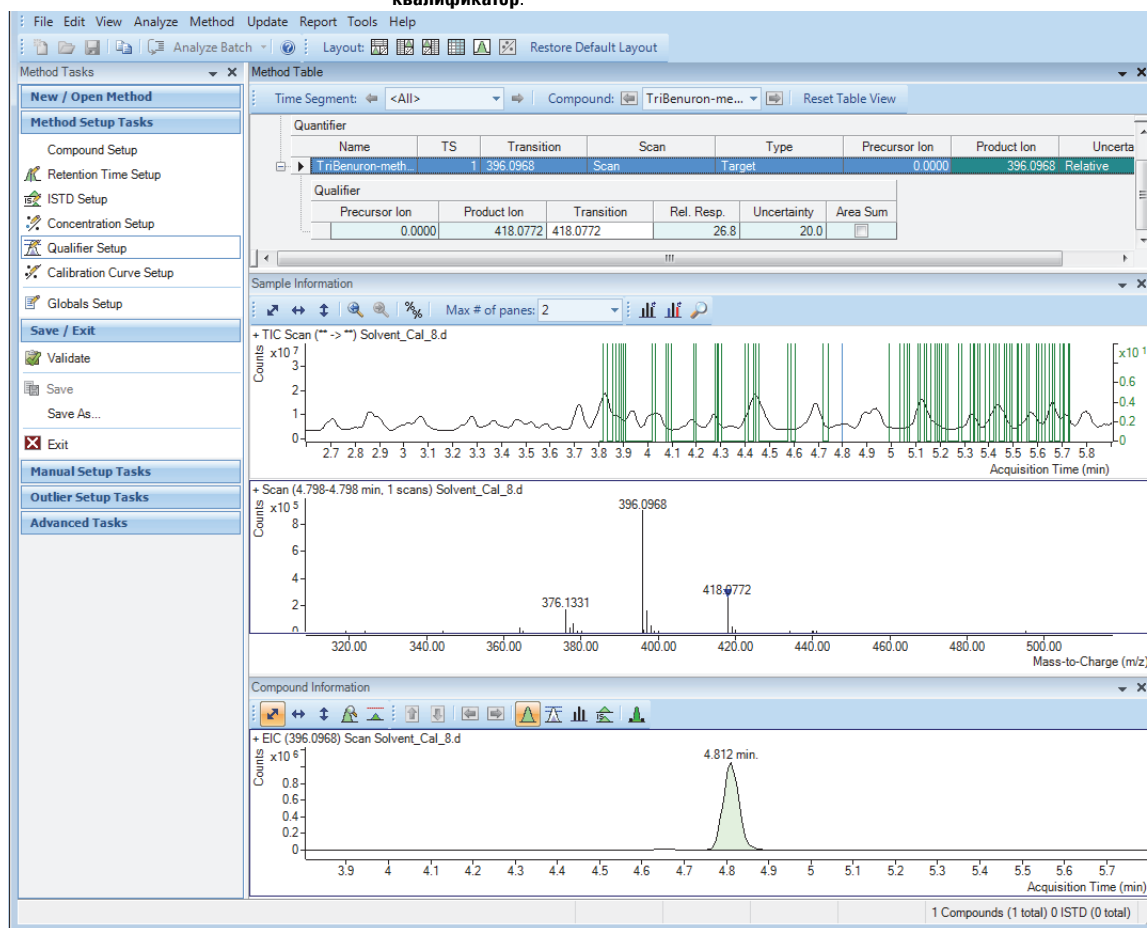
Подробные инструкции

Комментарии

- e** Введите Tribenuron-methyl в поле **Имя** в окне **Таблица метода**. Оставьте это соединение выделенным в таблице методов при добавлении квалификаторов на следующем шаге.
- f** Чтобы снова открыть спектр для **Tribenuron-methyl**, щелкните вершину пика, чтобы отобразить линию, проходящую через вершину.
- g** Нажмите на значение **418,0776**, чтобы выбрать этот ион (синий закрашенный треугольник). Щелкните правой кнопкой мыши в этом месте и выберите **Новый квалификатор**.

- Можно выбрать несколько ионов-квалификаторов.
- Значение m/z , выбранное в спектре, указывается синим треугольником.

Квалификатор добавляется к таблице метода, как указано ниже.



Задание 3. Отладка целевых соединений

С помощью этого задания вы научитесь проверять дочерние ионы и данные ВУ для нового метода количественного анализа, которые можно изменять для отдельных целевых соединений.

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
Проверьте на предмет дочерних ионов новый метод количественного анализа, созданный в окне Сведения пробы.	a Чтобы проверить время удерживания, установленное на основе спектра, выберите Задачи отладки метода > Отладка времени удерживания. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод выберите Задачи отладки метода > Отладка времени удерживания. b В столбце Дельта ВУ слева введите 0, 2. c В столбце Дельта ВУ справа введите 0, 2.	Для отдельных соединений можно изменять поля данных, выделенные синим цветом.

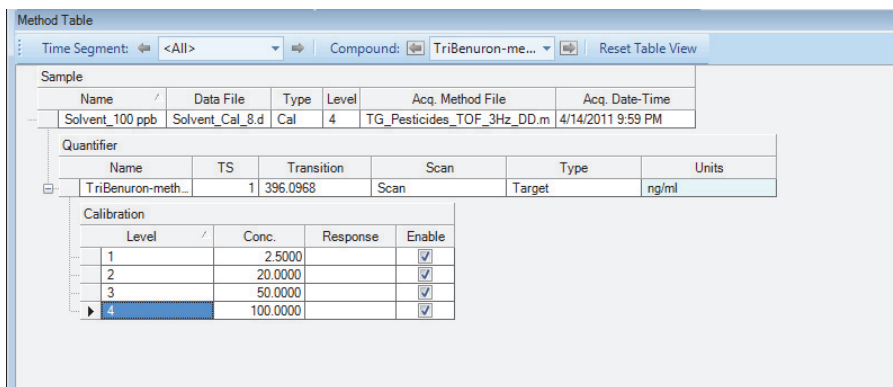
Method Table									
Level Name Prefix:		# of Levels: 10		Create Levels		Time Segment: <All>		Compound: Tribenuron-me...	
Sample									
Name		Data File	Type	Level	Acq. Method File		Acq. Date-Time		
Solvent_100 ppb		Solvent_Cal_8.d	Cal	4	TG_Pesticides_...		4/14/2011 9:59...		
Quantifier									
Name		TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
▶ Tribenuron-meth...		1	396.0966	Scan	Target	4.813	0.200	0.200	Minutes

Задание 4. Отладка количественного анализа

Это задание содержит инструкции по отладке параметров количественного анализа для следующих составляющих метода:

- уровни калибровки;
- ионы-квалификаторы;
- аппроксимация калибровочных кривых.

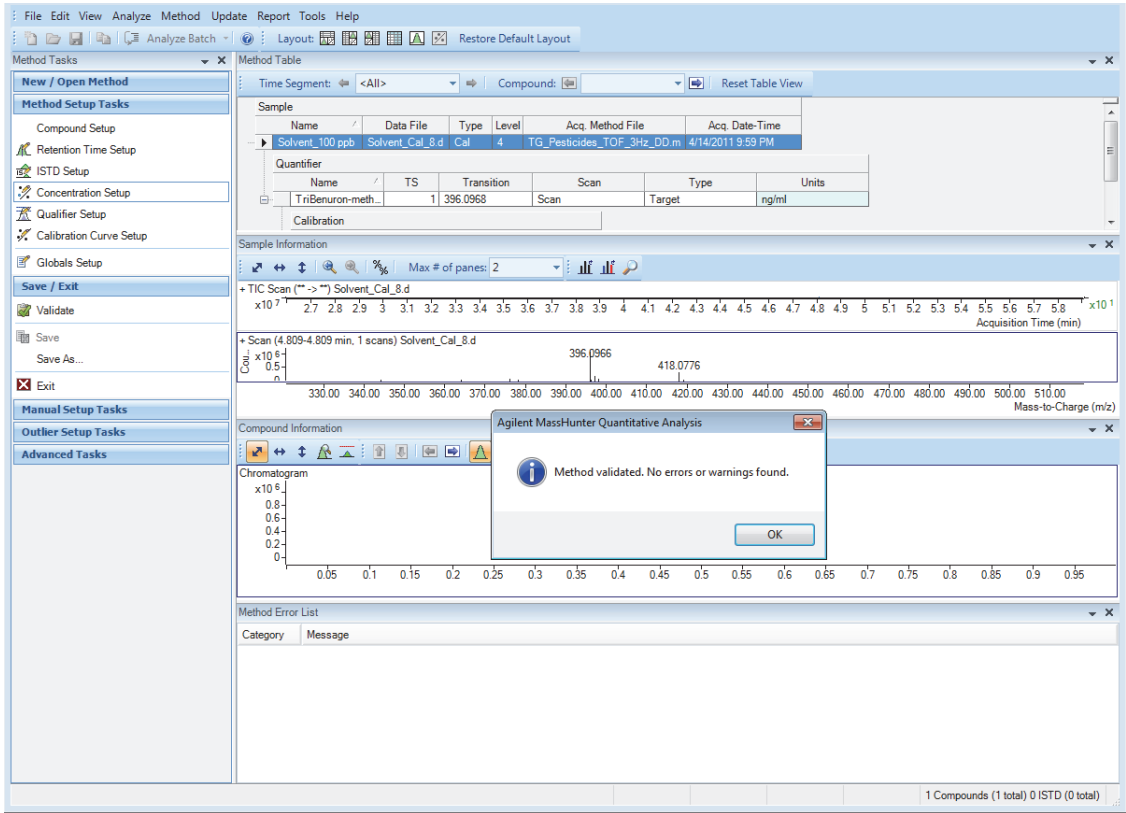
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Создайте четыре уровня калибровки.	a В главном меню выберите Метод > Создать уровни из калибровочных проб. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод выберите Калибровочная кривая > Создать уровни из калибровочных проб. Для каждого квантификатора в окне Таблица метода откроется таблица Калибровка. b Для одного из квантификаторов замените используемые по умолчанию концентрации на фактическую концентрацию для каждого уровня. • L1 – 2,5000 • L2 – 20,0000 • L3 – 50,0000 • L4 – 100,0000	



2 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 4. Отладка количественного анализа

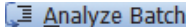
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Проверьте правильность метода и сохраните его.	а Выберите Сохранить/Выйти > Валидировать , чтобы проверить правильность параметров метода.	• Внизу экрана можно увидеть все ошибки, выявленные во время валидации.



- б** Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **ОК**.
- с** На вкладке **Сохранить/Выйти** нажмите **Выйти**, затем выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

Задание 5. Анализ и сохранение метода

В этом упражнении выполняется автоматический количественный анализ серии, и сохраняются результаты.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Выполните анализ серии и проверьте результаты для каждого соединения. Проверьте сообщения о количественном анализе, в которых указываются пробы, сигналы которых не оцениваются количественно.	Щелкните значок Анализировать серию  на панели инструментов, чтобы начать анализ серии. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Анализировать серию.	
2 Сохраните серию.	a Выберите Файл > Сохранить серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Сохранить серию. b Выберите Файл > Закреть серию, чтобы закрыть серию.	

2 Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 5. Анализ и сохранение метода



Упражнение 3

Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии	44
Задание 2. Изменение макетов окна результатов	48
Задание 3. Экспорт и печать результатов	56

Задачи в этом упражнении показывают, как проверять данные пробы и соединения в файле серии, задавать макеты результатов, экспортировать данные в Microsoft Excel, предварительно просматривать и печатать данные.

В этом упражнении используйте серию **DrugsOfAbuse**. Аналогичные задачи можно выполнить с файлами данных Triple Quad, Q-TOF и TOF.

Каждое упражнение представлено в виде таблицы, состоящей из трех столбцов:

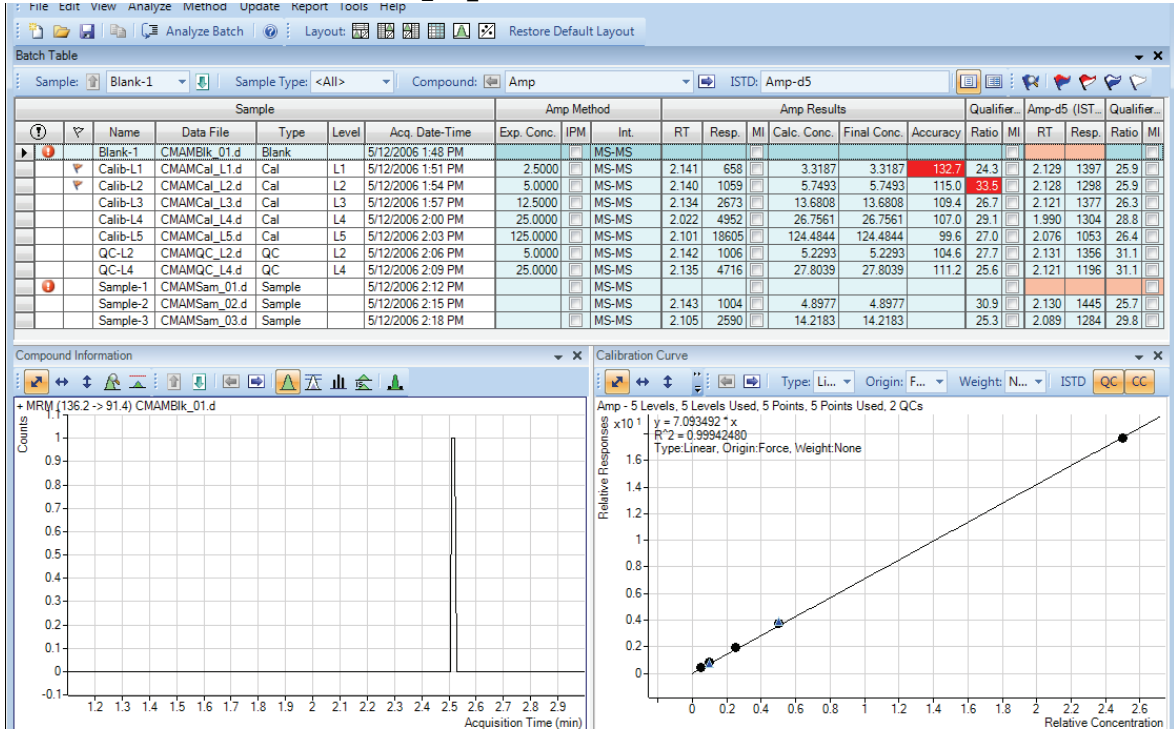
- Шаги — следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции — используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения.
- Комментарии — здесь представлены советы и дополнительная информация о каждом этапе упражнения.



Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

Эта задача показывает, как с помощью прокрутки просматривать пробы и соединения, при этом наблюдая за изменениями данных в таблице серии и сведениях о соединениях. Она показывает также, как отображать пробы различных типов.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	Откройте файл серии iii_Test_01.batch.bin, созданный в упражнении 1. а Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок Количественный анализ на рабочем столе . б Щелкните значок Открыть серию  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно Открыть серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Открыть серию. в Перейдите в папку \Ваш каталог\DrugsOfAbuse и щелкните файл iii_Test_01.batch.bin	Отобразится главное представление, которое должно выглядеть так, как показано ниже. Это макет по умолчанию, который использует параметры по умолчанию для столбцов.



Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 (Необязательно) Если отображается не тот макет, что показан на рисунке на предыдущей странице... - Если в главном представлении меньше трех окон или они расположены по-другому, восстановите макет по умолчанию. - Если параметры столбцов отличаются, восстановите параметры столбцов, используемые по умолчанию. - Если в окне Сведения о соединении помимо панели хроматограммы присутствуют другие панели, скройте их.	- Чтобы восстановить макет по умолчанию, нажмите Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем прокручивать от одной пробы к другой. Restore Default Layout - В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию. - Чтобы восстановить используемые по умолчанию параметры столбцов, щелкните правой кнопкой мыши в любом месте окна Таблица серии и выберите пункт Восстановить столбцы по умолчанию. - Чтобы скрыть лишние панели, щелкните выделенные значки, кроме значка «Показать/скрыть хроматограмму»  на панели инструментов окна сведений о соединении.	Используемый по умолчанию макет устанавливается на заводе, и его невозможно изменить. Если нужно создать свой собственный макет, см. «Задание 2. Изменение макетов окна результатов» на стр. 48.
3 Прокручивайте от одной пробы к другой до тех пор, пока не достигнете конца окна Таблица серии, а затем вернитесь к Cal-L5.	a Щелкайте стрелку Следующая проба  на стандартной панели инструментов в окне таблицы серии до тех пор, пока не появится нужная проба. Проверьте изменения в окне Сведения о соединении. b Чтобы вернуться к пробе Cal-L5, щелкните значок Предыдущая проба  на стандартной панели инструментов в окне таблицы серии. c Выберите любую ячейку в строке пробы Calib_L4 в окне Таблица серии, чтобы просмотреть изменения.	- Обратите внимание на взаимосвязь между выделенным файлом данных в окне Таблица серии и хроматограммой в окне Сведения о соединении. - Обратите внимание на изменения сведений об амфетамине для каждой пробы в окнах Таблица серии и Сведения о соединении.
4 Прокручивайте от соединения к соединению, пока не просмотрите все четыре соединения.	a Щелкайте стрелку Следующее соединение или Предыдущее соединение на панели инструментов до тех пор, пока не отобразится нужное соединение. Compound:  1: Meth  b Проверьте изменения в окнах Таблица серии, Сведения о соединении и Калибровочная кривая. c Щелкните раскрывающую стрелку рядом со списком Соединение. d Выберите Cocaine.	

3 **Просмотр результатов количественного анализа**
Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5	Проверьте результаты для нескольких проб. - Просмотрите ВУ для каждого соединения пробы Cal-L4. - Посмотрев результаты для всех соединений, вернитесь к просмотру результатов по кокаину.	
	а Щелкните значок В таблице серии отображать несколько соединений/проб на панели инструментов, чтобы отобразить результаты количественного анализа для всех четырех целевых соединений. Можно также выбрать Вид > Макет таблицы серии > Просмотр нескольких соединений/проб. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Макет таблицы серии > Просмотр нескольких соединений/проб.	В режимах просмотра нескольких соединений/проб и одного соединения/пробы отображаются разные наборы столбцов. Если в режиме просмотра нескольких соединений/проб добавить столбец в таблицу, то это изменение не произойдет автоматически в режиме просмотра одного соединения/пробы.
	б Щелкните ячейку Cal-L4 и обратите внимание на различия ВУ в окне Сведения о соединении для каждого соединения.	
	с Чтобы вернуться к отображению подробных результатов количественного анализа для выбранного целевого соединения, щелкните значок В таблице серии отображать одно соединение/пробу на панели инструментов. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Макет таблицы серии > Просмотр одного соединения/пробы.	
	д При необходимости щелкните раскрывающую стрелку рядом со списком Соединение и выберите Cocaine.	

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - DrugsOfAbuse_B0500 - iii_Test_01

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

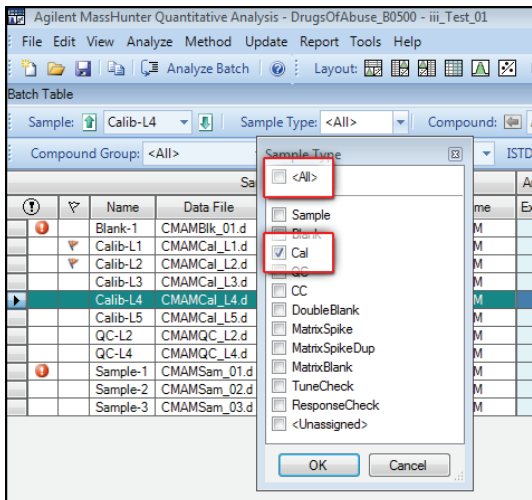
Analyze Batch Layout: Restore Default Layout

Batch Table

Sample: Calib-L4 Sample Type: <All> Compound: Cocaine ISTD: Cocaine-d3

Sample							Cocaine Method			Cocaine Results					Qualifier	Cocaine-d3 (L)			Qualifier		
?	▼	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	IPM	Int.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI
		Blank-1	CMAMBIk_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM			MS-MS	2.433	20		11.8235	11.8235				2.403	15		
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000		MS-MS	2.453	5189		2.3087	2.3087	92.3	3.7		2.452	20245	4.0	
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000		MS-MS	2.454	9716		4.2682	4.2682	85.4	3.9		2.453	20506	4.0	
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000		MS-MS	2.455	25187		11.5607	11.5607	92.5	3.9		2.450	19625	4.4	
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Cal	L4	5/12/2006 2:00 PM	25.0000		MS-MS	2.449	50649		25.2511	25.2511	101.0	3.9		2.448	18068	4.2	
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	5/12/2006 2:03 PM	125.0000		MS-MS	2.449	199967		125.0768	125.0768	100.1	3.8		2.446	14401	3.7	
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	5/12/2006 2:06 PM	5.0000		MS-MS	2.453	9246		4.2831	4.2831	85.7	3.5		2.453	19446	4.4	
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	5/12/2006 2:09 PM	25.0000		MS-MS	2.455	48582		24.5377	24.5377	98.2	4.0		2.454	17834	3.9	
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Sample		5/12/2006 2:12 PM			MS-MS												
		Sample-2	CMAMSam_02.d	Sample		5/12/2006 2:15 PM			MS-MS	2.460	9735		4.3735	4.3735		3.6		2.459	20051	3.6	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	Sample		5/12/2006 2:18 PM			MS-MS	2.460	9735		4.3735	4.3735		3.6		2.459	20051	3.6	

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Просмотрите выбранные типы проб. - Отобразите только калибровочные стандарты. - Затем отобразите все типы проб.	a Щелкните раскрывающую стрелку возле списка Тип пробы. Откроется диалоговое окно Тип пробы. b Снимите флажок <Все> и установите флажок Кал. c Нажмите ОК. Окно Таблица серии должно содержать только стандарты Кал. для кокаина. d Щелкните раскрывающую стрелку возле списка Тип пробы. e Щелкните <Все>, затем нажмите кнопку ОК. Система установит все флажки и отобразит все типы проб.	

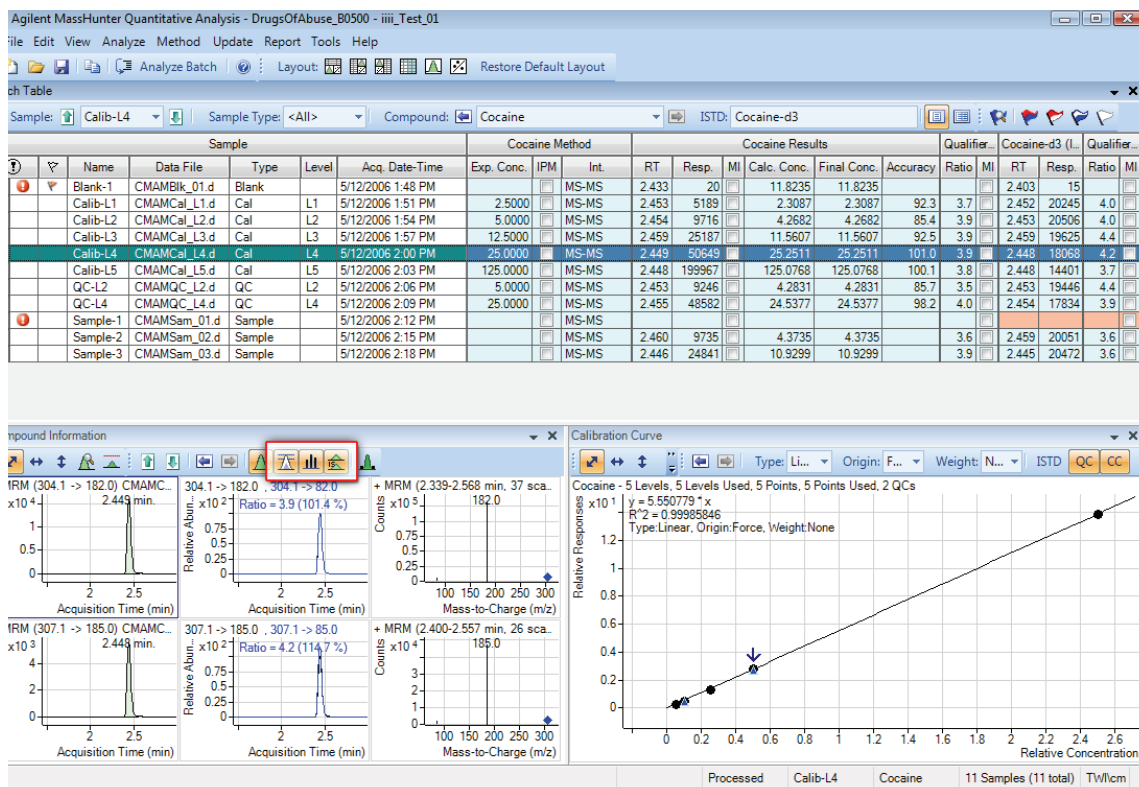


Задание 2. Изменение макетов окна результатов

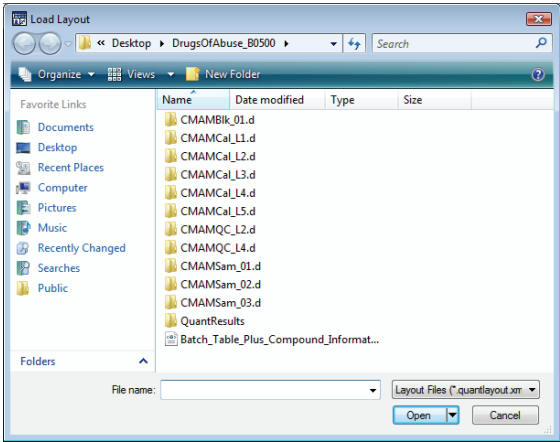
Эта задача показывает, как изменять макет и как воссоздавать макет, используемый по умолчанию.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 С помощью значков макета на панели инструментов расположите окна Таблица серии, Сведения о соединении и Калибровочная кривая.	a На панели инструментов щелкните значок Макет - таблица влево . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Предустановленный макет > Таблица слева. b На панели инструментов щелкните значок Макет - таблица вправо . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Предустановленный макет > Таблица справа. c Щелкните значок Макет - таблица вверх . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Предустановленный макет > Таблица сверху.	
2 С помощью значков макета разверните каждое окно по отдельности:	a На панели инструментов щелкните значок Развернуть таблицу . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Развернуть панель > Развернуть таблицу. b На панели инструментов щелкните значок Развернуть сведения о соединении . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Развернуть панель > Развернуть сведения о соединении. c На панели инструментов щелкните значок Развернуть калибровочную кривую . В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Развернуть панель > Развернуть калибровку. d Чтобы вернуться к макету по умолчанию, щелкните значок Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.	

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Смените панели в окне Сведения о соединении для Cal-L4.	a В окне Таблица серии выберите строку Cal-L4. b На панели инструментов окна сведений о соединении щелкните значок Показать/скрыть квалификаторы c Щелкните значок Показать/скрыть спектр d Щелкните значок Показать/скрыть внутренний стандарт Макет и результаты будут выглядеть так, как на следующем рисунке.	- На этом шаге предполагается, что данная задача начата, когда в окне Сведения о соединении только панель хроматограммы. - Изменения макета повлияют только на положение и видимость шести панелей. Изменение макета не влияет на панели в окне Сведения о соединении.



3 Просмотр результатов количественного анализа
Задание 2. Изменение макетов окна результатов

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4 Сохраните используемый по умолчанию макет без калибровочной кривой.	a Закройте окно Калибровочная кривая. b Выберите Вид > Макет окна > Сохранить макет. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Загрузить/сохранить макет > Сохранить макет. Откроется диалоговое окно Сохранить файл макета. c Присвойте файлу макета имя Таблица серии плюс Сведения о соединении и нажмите кнопку Сохранить.	
5 Загрузите вновь созданный макет.	a Щелкните значок Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию. b Выберите Вид > Макет окна > Загрузить макет. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Загрузить/сохранить макет > Загрузить макет. Откроется диалоговое окно Загрузить макет.	
		
	c Щелкните файл Таблица серии и Сведения о соединении и нажмите кнопку Открыть. Теперь окно результатов должно выглядеть как на Рис. 7.	

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

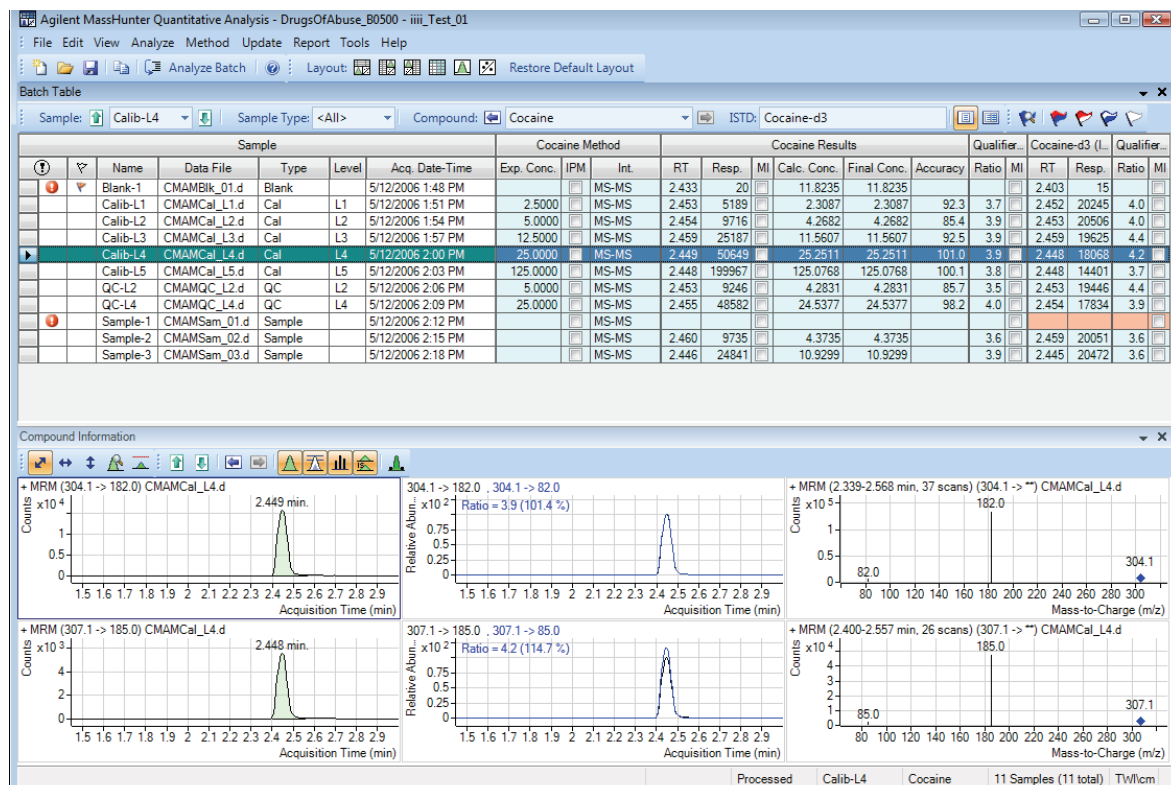
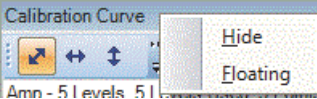


Рис. 7 Окно результатов

3 Просмотр результатов количественного анализа
Задание 2. Изменение макетов окна результатов

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Создайте макет, как показано на Рис. 8 на стр. 53.	a Восстановите макет по умолчанию (щелкните значок Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов). В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию. b Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна Калибровочная кривая и установите флажок Плавающее.  c Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна Сведения о соединении и установите флажок Плавающее. d Измените размер окон в соответствии с макетом на Рис. 8.	• Обратите внимание на то, что окно Таблица серии находится слева.

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

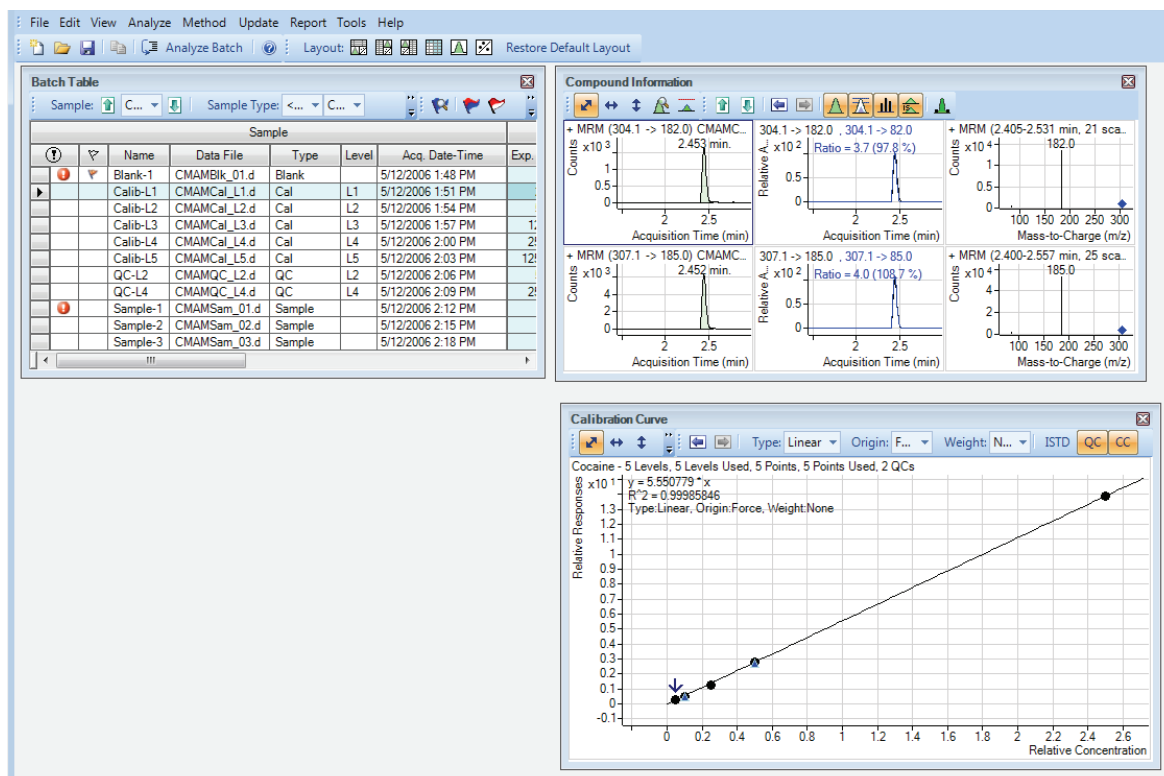


Рис. 8 Отображение с плавающими окнами калибровочной кривой и сведений о соединении

- е Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Сведения о соединении** и снимите флажок **Плавающее**.
- ф Измените размер окон в соответствии с макетом на Рис. 9.

3 Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

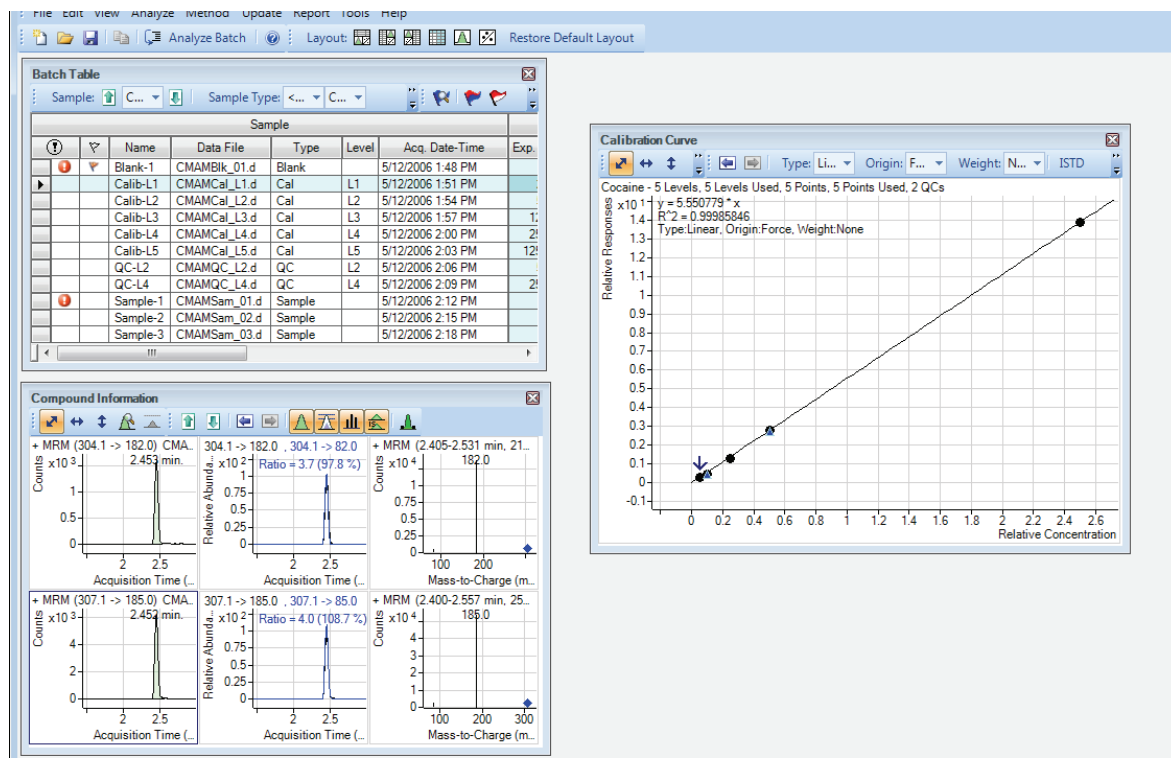


Рис. 9 Окно измененного размера

- g Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Калибровочная кривая** и снимите флажок **Плавающее**.
- h Переместите окно **Сведения о соединении** таким образом, чтобы макет соответствовал показанному на рисунке в начале задачи.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Воссоздайте (не восстанавливайте) макет по умолчанию.	- Разверните главное представление программы. - Чтобы воссоздать макет по умолчанию, сначала привяжите окно Калибровочная кривая, а затем окно Сведения о соединении. - Если после привязки двух окон калибровочная кривая расположена слева, щелкните правой кнопкой мыши строку заголовка окна Калибровочная кривая и перетащите его вправо. Появившийся серый прямоугольник показывает, куда будет помещено это окно в главном представлении. - Перетащите калибровочную кривую в нижний правый угол главного представления.	

Задание 3. Экспорт и печать результатов

Это упражнение обучает экспорту данных в файл Microsoft Excel, а также предварительному просмотру и печати данных таблицы серии и сведений о соединении.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Экспортируйте файл серии <i>iii_Test_01</i> .	a Чтобы активировать окно Таблица серии, щелкните его строку заголовка. b Выберите Файл > Экспорт > Экспорт таблицы. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way щелкните правой кнопкой мыши в окне Таблица серии и выберите Экспорт таблицы. c В качестве каталога назначения выберите Мои документы. d Для файла экспорта введите имя <i>iii_Test_01.xlsx</i>. e Нажмите кнопку Сохранить. Автоматически откроется файл Excel Мои документы\iii_Test_01.xlsx.	• <i>iii</i> — инициалы пользователя.

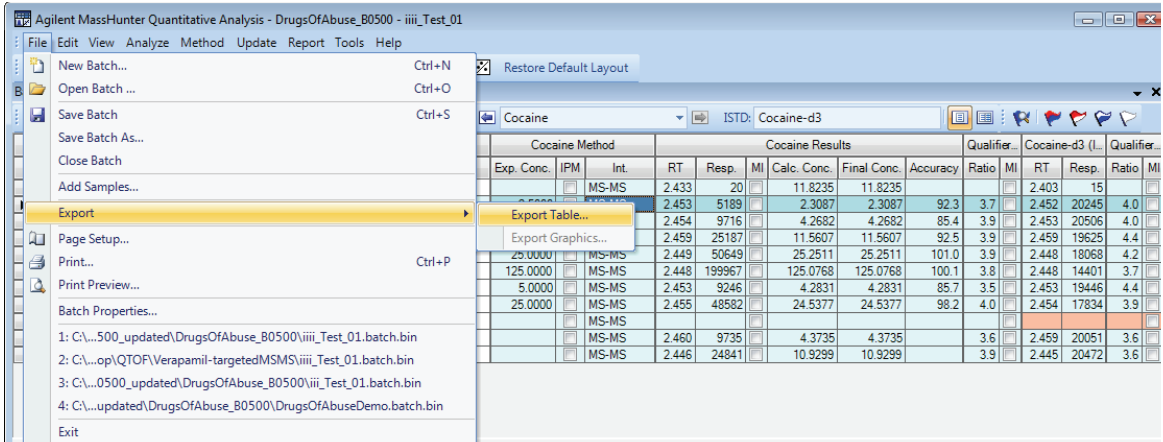


Рис. 10 Экспорт результатов

2 Посмотрите результаты серии в том виде, как они выглядят в Excel, затем выйдите из Excel.	a Обратите внимание на то, какие данные экспортируются, а какие нет. b По завершении закройте Excel.
--	--

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

iii_Test_01.xlsx - Microsoft Excel

FileHomeInsertPage LayoutFormulasDataReviewViewMASSHUNTER REPORTINGAdd-InsAcrobat

Cut

Copy

Format Painter

Paste

Clipboard

Microsoft Sans Ser

8

Wrap Text

General

Conditional Formatting

Format as Table

Cell Styles

Insert

Delete

Forecast

Alignment

Number

Font

Alignment

Number

Styles

Cells

A1

Sample

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
1				Sample				Amp Method				Amp Results			(136.2 -> 119.4) p-d5 (ISTD) Result			41.1 -> 124.		
2			Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI
3			Blank-1	CMAMBlk_01.d	Blank		#####				##					FALSE				###
4			Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	#####	2.5	2.14	657.86	##	2.481804	2.481804	99.27216	24.3	FALSE	2.128	1411.6	25.6	###
5			Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	#####	5	2.14	1073.4	##	4.92750484	4.9275048	98.5501	33	FALSE	2.128	1304.21	25.8	###
6			Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	#####	12.5	2.134	2686.4	##	12.5996995	12.599699	100.7976	26.6	FALSE	2.122	1382.59	26.2	###
7			Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Cal	L4	#####	25	2.02	5138.7	##	25.3646582	25.364658	101.4586	28	FALSE	1.99	1350	27.9	###
8			Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	#####	125	2.102	19277	##	124.634283	124.63428	99.70743	27.1	FALSE	2.078	1053.49	26.4	###
9			QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	#####	5	2.14	1010.9	##	4.41037325	4.4103733	88.20747	27.6	FALSE	2.128	1352.25	31.2	###
10			QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	#####	25	2.134	4721.2	##	26.3121136	26.312114	105.2485	25.8	FALSE	2.122	1196.84	31.1	###
11			Sample-1	CMAMSam_01.d	Sample		#####		2.027	38.431	##					FALSE				###
12			Sample-2	CMAMSam_02.d	Sample		#####		2.14	1004.9	##	3.94583625	3.9458363		30.8	FALSE	2.128	1478.28	25.1	###
13			Sample-3	CMAMSam_03.d	Sample		#####		2.102	2590.7	##	13.0294532	13.029453		25.3	FALSE	2.09	1291.64	29.6	###

Рис. 11 Таблица серии в Excel

3 Предварительно просмотрите распечатки данных таблицы серии и сведений о соединении.

- В программе Excel выберите **Файл > Печать**.
- Проверьте изображение в окне **Предварительный просмотр печати**, чтобы убедиться в том, что оно выглядит нужным образом.
- Выберите **Файл > Печать**.
- Повторите шаги а–е для сведений о соединении.
- Если не нужно переходить к упражнению 4, выберите **Файл > Сохранить серию**.
В пользовательском интерфейсе **Quant-My-Way** во вкладке **Главная** щелкните **Сохранить серию**.
- Выберите **Файл > Выход**.

Окно **Таблица серии** можно распечатать также из программы **Предварительный просмотр печати**, выбрав **Файл > Печать** в меню программы **Предварительный просмотр печати**.

3 Просмотр результатов количественного анализа

Задание 3. Экспорт и печать результатов



Упражнение 4

Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой 60

Задание 2. Непараметрическое интегрирование 63

Задание 3. Обнаружение выбросов 78

В этом упражнении будут использованы три инструмента, которые помогут оценить и получить более точные результаты количественного анализа:

- Помощник аппроксимации кривой, который рассчитывает все комбинации кривых и предоставляет результаты вместе с уравнением и доверительным интервалом.
- Непараметрический интегратор, благодаря которому не нужно раздумывать, какие параметры необходимо изменить, чтобы улучшить интегрирование.
- Сообщения о выбросах, которые помогают без труда выявить значения результатов, выходящие за пределы указанного диапазона.

В этом упражнении используется серия DrugsOfAbuse. Те же самые задачи можно выполнить с файлами данных Triple Quad, Q-TOF и TOF.

Каждое упражнение представлено в виде таблицы, состоящей из трех столбцов:

- Шаги — следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции — используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения.
- Комментарии — здесь представлены советы и дополнительная информация о каждом этапе упражнения.



Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой

Это задание показывает, как обнаружить выброс за пределы точности для соединения, скорректировать аппроксимацию кривой и повторить анализ серии.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 При необходимости откройте файл серии <i>iii_Test_01.batch.bin</i> .	a Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок Количественный анализ (QQQ)  на рабочем столе. b Щелкните значок Открыть серию  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно Открыть серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Открыть серию. c Перейдите в папку \Ваш каталог\DrugsOfAbuse и щелкните файл <i>iii_Test_01.batch.bin</i>.	- Эту программу также можно запустить, выбрав Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ) в меню Пуск. - Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем открывать серию. Restore Default Layout - В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.

- 2 Найдите выброс за пределы точности для амфетамина и измените аппроксимацию кривой.
- a Убедитесь, что в окне **Таблица серии** задан режим отображения одного соединения и в качестве целевого соединения отображается **Amp**. См. фрагмент рисунка внизу.



- b Установите курсор в ячейку на пересечении строки **Calib-L1** и столбца **Точность**, чтобы отобразить сообщение о выбросе, показанное ниже.
- Ячейки с выбросами могут быть окрашены в красный цвет (вверх) или синий цвет (вниз).

Agilent MassHunter Quantitative Analysis (for QQQ) - DrugsOfAbuse - iii_Test_01.batch.bin

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch

Layout

Restore Default Layout

Batch Table

Sample: C...

Sample Type: <All>

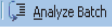
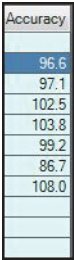
Compound: Amp

ISTD: Amp-

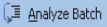
Sample					Amp Met.	Amp Results										Qualite...		Amp-d5 (IS...		Qualite...	
?	▼	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI		
		Blank-1	CMAMBIk_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM															
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000	2.140	658		3.1761	3.1761	127.0	24.3		2.128	1412	25.6			
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000	2.140	1073		5.6092	5.6092									
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000	2.134	2686		13.2419	13.2419									

Outlier(s)

Amp: Accuracy value = 127.0 is outside the allowed range [80.0, 120.0]

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	с В окне Калибровочная кривая установите для параметра Начало координат значение Игнорировать, а для параметра Вес — 1/у. Программа выведет на экран новую формулу аппроксимации кривой и значение R^2.	Начало координат аппроксимации кривой • Принудительно — линия аппроксимации кривой принудительно проходит через начало координат ($X=0$, $Y=0$). • Игнорировать — не требуется, чтобы линия аппроксимации кривой использовала начало координат ($X = 0$, $Y = 0$). Вес аппроксимации кривой • Нет — присвоение одинакового веса всем точкам данным. • 1/Y — применение формулы $1/Y$ к точкам данных. Эта формула снижает влияние высоких значений Y и усиливает влияние низких значений Y.
3 Выполните анализ серии и проверьте результаты в окне Таблица серии.	a Щелкните значок Анализировать серию  на панели инструментов, чтобы проанализировать серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Анализировать серию. b После анализа серии проверьте результаты в окне Таблица серии. 	
4 Найдите выбросы за пределы точности, если таковые есть, для других соединений.	a Щелкните значок Следующее соединение  на панели инструментов Таблица серии, чтобы просмотреть отдельные соединения, такие как кокаин, MDMA и метамфетамин. b Изучите результаты количественного анализа, в частности значения в столбце Точность.	• Обратите внимание на то, что значение точности для стандарта Calib-L3 метамфетамина выходит за пределы указанного диапазона.

4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Измените аппроксимацию кривой для метамфетамина и выполните анализ серии.	a В окне Аппроксимация калибровочной кривой установите для параметра Начало координат значение Игнорировать, а для параметра Вес — значение 1/у. Программа Quantitative Analysis выведет на экран пересмотренную формулу аппроксимации кривой и значение R2. b Щелкните значок Анализировать серию  на главной панели инструментов, чтобы проанализировать серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Анализировать серию. После анализа серии в окне Таблица серии отобразятся новые результаты.	

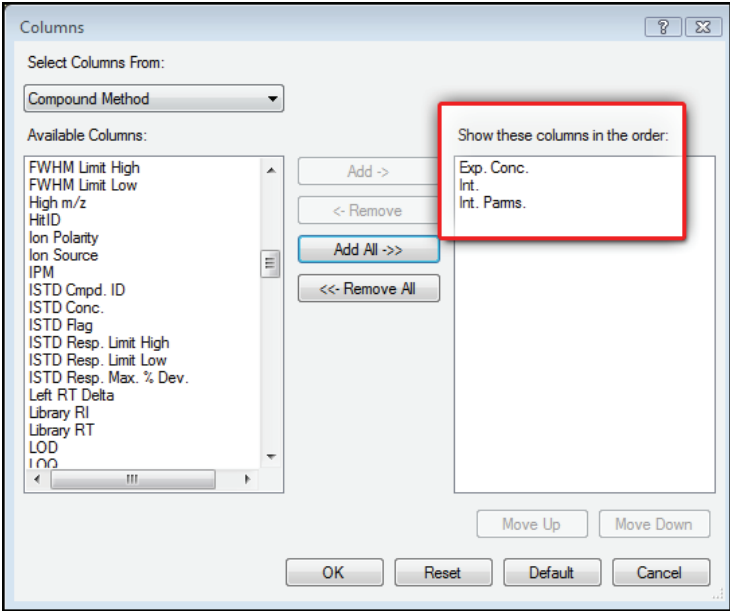
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Это задание показывает, как проверять данные на предмет правильности интегрирования. Вы научитесь выполнять следующие задачи:

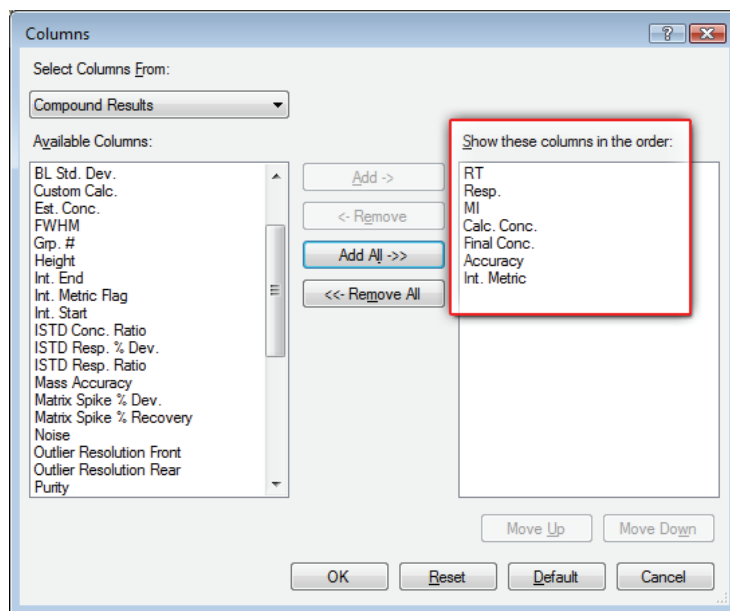
- Добавлять столбцы интегрирования в таблицу серии.
- Просматривать используемые по умолчанию значения интегрирования.
- Внимательно изучать хроматограмму, отыскивая такие подробности, как:
 - сообщение о выбросах;
 - параметры базовой линии;
 - метки пиков.

4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Добавьте столбцы интегрирования в таблицу серии.	a Щелкните правой кнопкой мыши в окне Таблица серии и выберите Добавить/удалить столбцы. Откроется диалоговое окно Столбцы. b Выберите пункт Метод соединения в раскрывающемся списке Выбрать столбцы из. c Выберите Инт. (тип интегратора) и Парам. инт. (параметры интегратора) в списке Доступные столбцы и нажмите кнопку Добавить. Программа Quantitative Analysis переместит выбранные столбцы в список Показывать эти столбцы в данном порядке.	В этой задаче предполагается, что серия iii_Test_01 уже открыта. В противном случае см. шаг 1 в задании 1.



Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
d	Выберите пункт Результаты по соединению в раскрывающемся списке Выбрать столбцы из .	
e	Выберите Метрика инт. (метрика интегратора) в списке Доступные столбцы и нажмите кнопку Добавить . Система переместит выбранный столбец в список Показывать эти столбцы в данном порядке .	
f	Нажмите ОК .	



4 Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
------	----------------------	-------------

2 Просмотрите используемые по умолчанию значения интегрирования для амфетамина.

- a Щелкните значок **Предыдущее соединение**  на панели инструментов таблицы серии, чтобы просмотреть амфетамин (**Amp**).
- b Рассмотрите используемые по умолчанию значения в столбцах **Инт.** и **Парам. инт.** в окне **Таблица серии**.

- Обратите внимание на то, что в качестве интегратора используется интегратор МС-МС, для которого не нужно вводить параметры. Вот почему столбец **Парам. инт.** пустой.

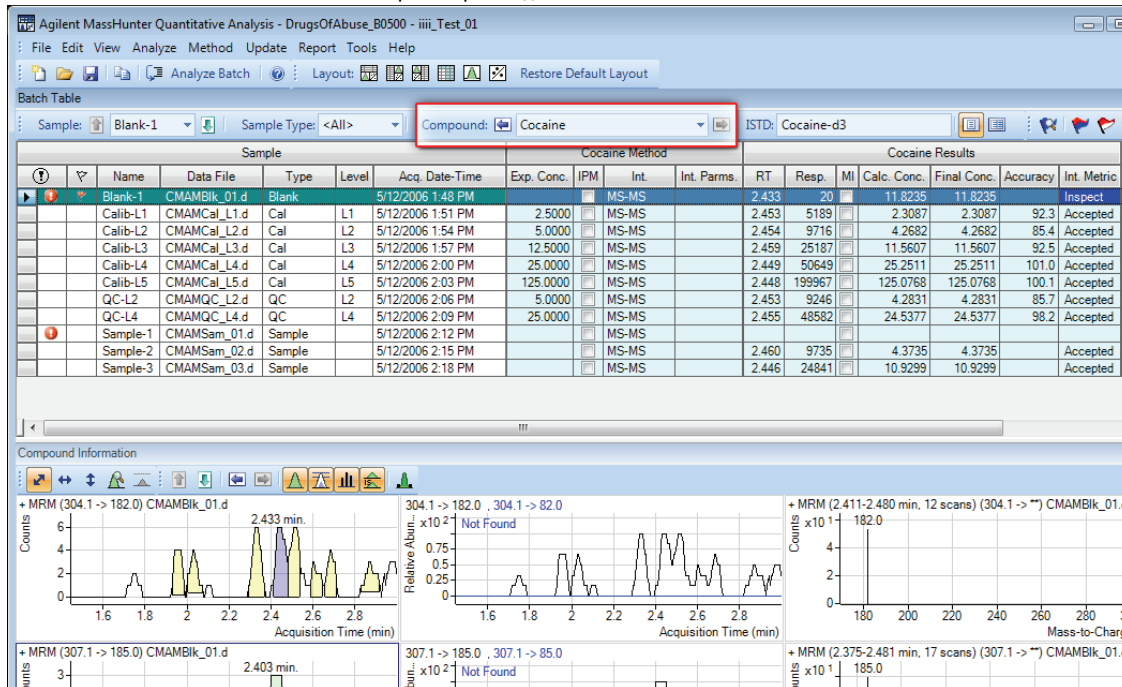
Int.	Int. Params.
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	

- c Рассмотрите используемые по умолчанию значения в столбце **Метрика инт.** в окне **Таблица серии**.

- Эти значения отражают используемую по умолчанию метрику качества интегрирования для целевого соединения амфетамин.

Amp Method			Amp Results						
Exp. Conc.	Int.	Int. Params.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Int. Metric
	MS-MS				☐				
2.5000	MS-MS		2.141	658	☐	2.4161	2.4161	96.6	Accepted
5.0000	MS-MS		2.140	1059	☐	4.8556	4.8556	97.1	Accepted
12.5000	MS-MS		2.134	2673	☐	12.8162	12.8162	102.5	Accepted
25.0000	MS-MS		2.022	4952	☐	25.9394	25.9394	103.8	Accepted
125.0000	MS-MS		2.101	18605	☐	124.0262	124.0262	99.2	Accepted
5.0000	MS-MS		2.142	1006	☐	4.3336	4.3336	86.7	Accepted
25.0000	MS-MS		2.135	4716	☐	26.9911	26.9911	108.0	Accepted
	MS-MS				☐				
	MS-MS		2.143	1004	☐	4.0008	4.0008		Accepted
	MS-MS		2.105	2590	☐	13.3556	13.3556		Accepted

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3	Просмотрите ошибки для кокаина и MDMA. Найдите сообщения о выбросе на пересечении столбца Метрика инт. и строки пробы Blank-1. а Закройте окно Калибровочная кривая. б Увеличьте относящуюся к хроматограмме часть панели управления окна сведений о соединении, чтобы отображались только хроматограммы квантификатора и квалификатора. Щелкните значок Показать/скрыть спектр.  в Также щелкните значок Показать/скрыть внутренний стандарт. г Щелкайте значок Следующая проба на панели инструментов  в окне Таблица серии до тех пор, пока не появится соединение Cocaine. е Выберите строку Blank-1 и наведите курсор на слово Проверка в столбце Метрика инт. в этой строке. Отобразятся все сообщения о выбросах для этих данных, а также интегрированная хроматограмма для кокаина.	



4 Использование трех инструментов для оценки результатов

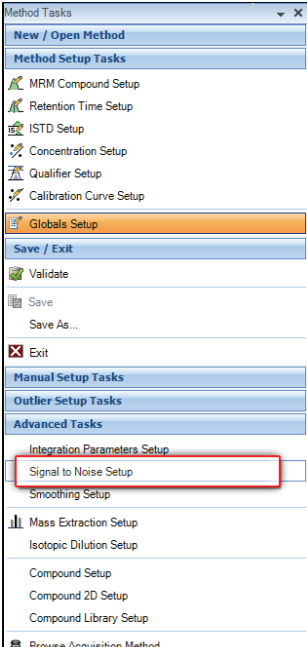
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	f На стандартной панели инструментов окна таблицы серии щелкайте значок Следующее соединение  или значок Предыдущая серия  до тех пор, пока не отобразится соединение MDMA. g Выберите строку Blank-1 и установите курсор на столбец Метрика инт. Отобразятся все сообщения о выбросах для этих данных, а также интегрированная хроматограмма для MDMA.	- В сообщении о выбросе говорится: «MDMA: Интегратор обнаружил следующие проблемы с пиком при ВУ = 2,4664: Проблема с помехами». - Обратите внимание на то, что для метрик интегрирования используются следующие цвета: Зеленый — принято. Синий — проверить. Красный — отклонено. - Эта цвета используются также для пиков.

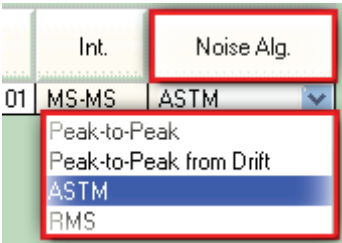
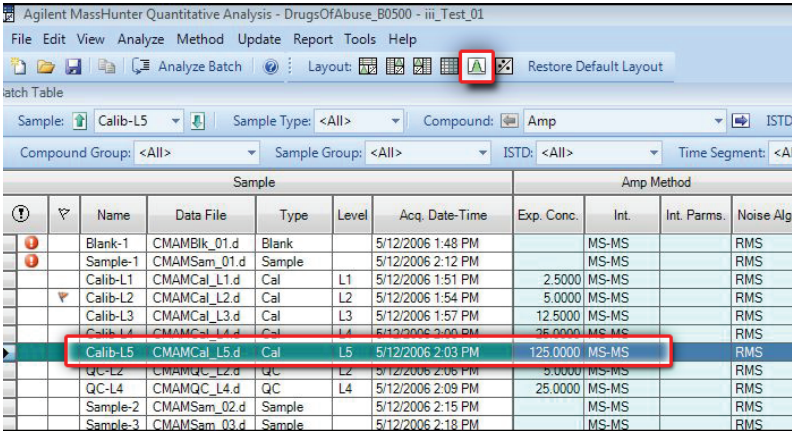
4 Смените алгоритм шума.

- a** Щелкните правой кнопкой мыши в окне **Таблица серии** и выберите **Добавить/удалить столбцы**. Откроется диалоговое окно **Столбцы**.
- b** Выберите пункт **Метод соединения** в раскрывающемся списке **Выбрать столбцы из**.
- c** Выберите **Алг. шума** (тип алгоритма шума) в списке **Доступные столбцы** и нажмите кнопку **Добавить**. Система переместит выбранный столбец в список **Показывать эти столбцы в данном порядке**.
- d** Нажмите **ОК**.
- e** Щелкайте значок **Предыдущее соединение**  на панели инструментов окна таблицы серии до тех пор, пока не появится соединение **Амр**.
- f** Рассмотрите значения в столбцах **Алг. шума** и **С/Ш** (соотношение сигнал-шум).

Amp Method				Amp Results							Qualifier		Amp-d5 (IST.		Qualifier	
Exp. Conc.	Int.	Int. Params.	Noise Alg	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Int. Metric	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI
	MS-MS		RMS													
2.5000	MS-MS		RMS	2.141	658		2.1151	2.1151	84.6	Accepted	24.3		2.129	1397	25.9	
5.0000	MS-MS		RMS	2.140	1059		4.5770	4.5770	91.5	Accepted	33.5		2.128	1298	25.9	
12.5000	MS-MS		RMS	2.134	2673		12.6107	12.6107	100.9	Accepted	26.7		2.121	1377	26.3	
25.0000	MS-MS		RMS	2.022	4952		25.8545	25.8545	103.4	Accepted	29.1		1.990	1304	28.8	
125.0000	MS-MS		RMS	2.101	18605		124.8426	124.8426	99.9	Accepted	27.0		2.076	1053	26.4	
5.0000	MS-MS		RMS	2.142	1006		4.0502	4.0502	81.0	Accepted	27.7		2.131	1356	31.1	
25.0000	MS-MS		RMS	2.135	4716		26.9159	26.9159	107.7	Accepted	25.6		2.121	1196	31.1	
	MS-MS		RMS													
	MS-MS		RMS	2.143	1004		3.7144	3.7144		Accepted	30.9		2.130	1445	25.7	

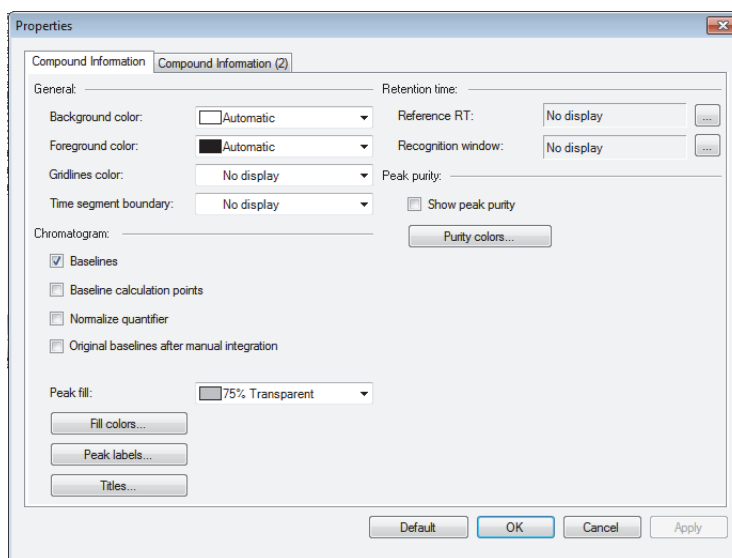
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Для тренировки поменяйте в методе алгоритм шума с RSM на ASTM для амфетамина. Выйдите, но не сохраняйте метод.	a Выберите Метод > Правка, чтобы переключить в режим редактирования метода. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Метод щелкните Правка. b В столбце Задачи метода выберите Дополнительные задачи > Отладка отношения сигнал-шум. В окне Таблица метода отобразятся параметры интегратора.  c В таблице метода щелкните раскрывающую стрелку возле столбца Алг. шума для амфетамина. Отобразится список имеющихся алгоритмов шума. d Выберите ASTM.	

4 Использование трех инструментов для оценки результатов
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

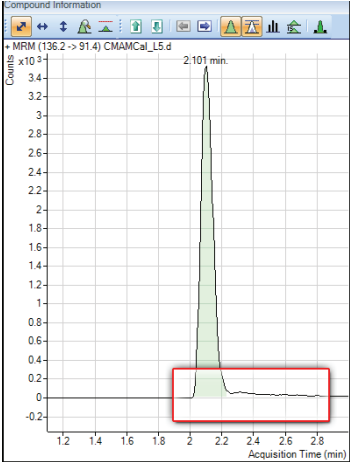
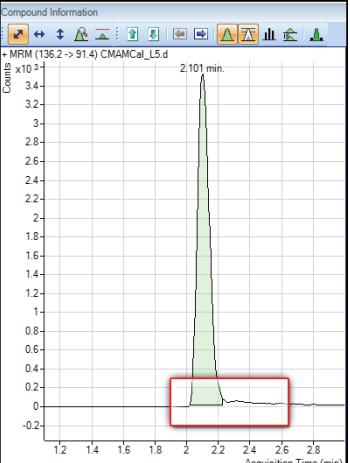
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		
e	В окне Задачи метода/Сохранить/Выйти нажмите кнопку Выход .	
f	Нажмите Нет в ответ на запрос Применить этот метод к серии? Система отобразит режим анализа серии.	
6	Отключите базовую линию (стандарт наивысшей концентрации), затем снова включите ее для амфетамина. Сравните две хроматограммы: одна при включенной, другая при выключенной базовой линии.	Обратите внимание на то, что для хроматограммы квантификатора базовая линия нарисована по умолчанию.
a	Выберите пробу Calib-L5 (если она еще не выбрана) и щелкните значок Развернуть сведения о соединении на панели инструментов. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид выберите Развернуть панель > Развернуть сведения о соединении. Убедитесь, что в окне видна только панель сведений о соединении.	
		

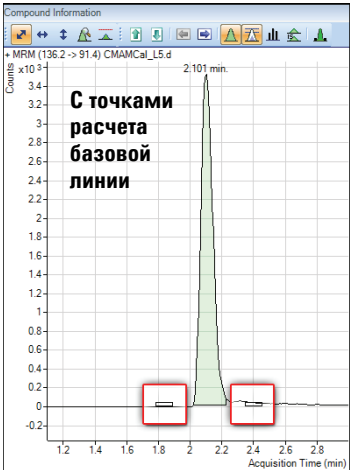
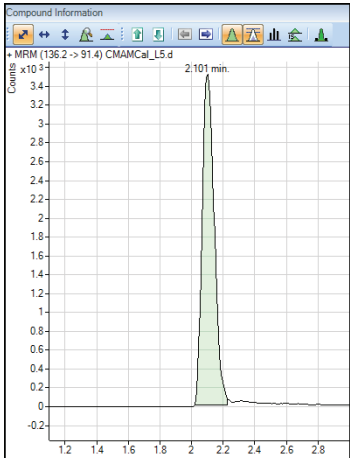
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
------	----------------------	-------------

- b Щелкните правой кнопкой мыши одну из двух хроматограмм, чтобы открыть контекстное меню.
- c Выберите пункт **Свойства** внизу контекстного меню, чтобы открыть диалоговое окно **Свойства**.



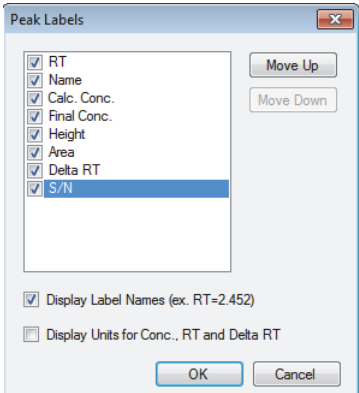
4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	d В диалоговом окне Свойства снимите флажок Базовые линии. e Нажмите кнопку Применить и посмотрите на пик без базовой линии.	Обратите внимание на то, что после снятия флажка базовых линий они исчезают. 
	f В диалоговом окне Свойства установите флажок Базовые линии. g Нажмите кнопку Применить и посмотрите на пик с базовой линией.	

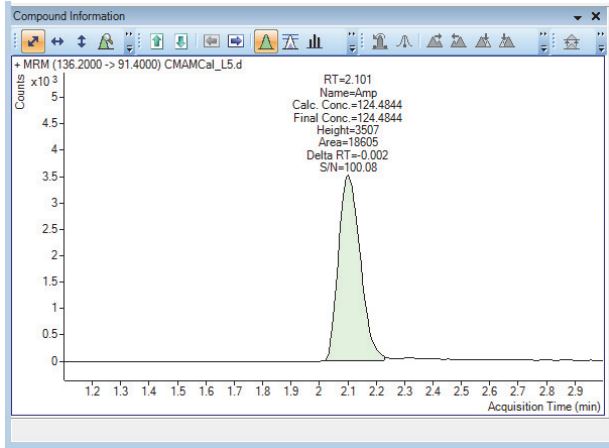
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Проверьте точки расчета базовой линии для амфетамина.	a В диалоговом окне Свойства установите флажок Точки расчета базовой линии. b Нажмите кнопку Применить и посмотрите, где начинается и заканчивается базовая линия.  c В диалоговом окне Свойства снимите флажок Точки расчета базовой линии. d Нажмите кнопку Применить и посмотрите на хроматограммы. e Сравните хроматограммы с точками расчета базовой линии и без них. 	

4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Отобразите метки пика для амфетамина.	a В диалоговом окне Свойства нажмите кнопку Метки пиков. Откроется диалоговое окно Метки пиков. b Установите все флажки Метки пиков и флажок Отображать имена меток. c Нажмите ОК.	

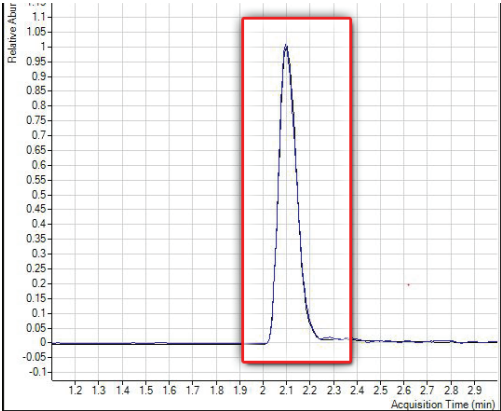
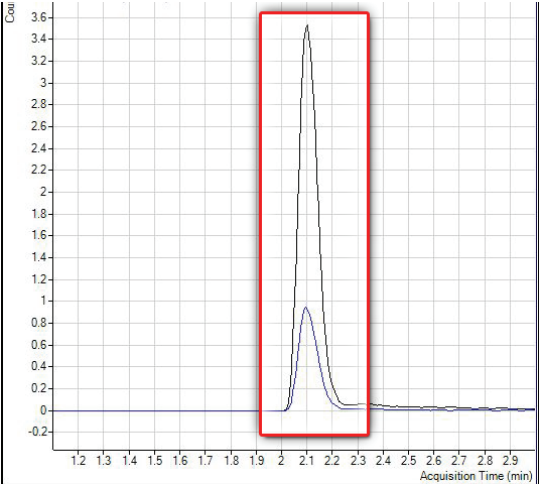


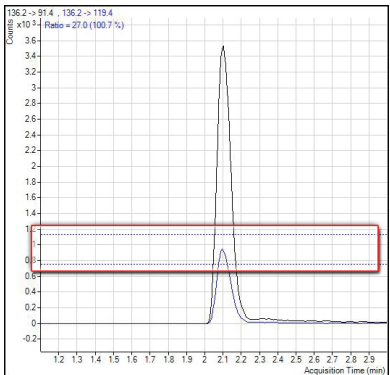
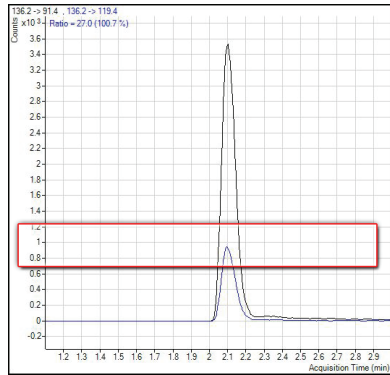
- d В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Применить**.
Теперь метки пика должны совпадать с теми, что показаны в приведенном ниже примере.



Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	e В диалоговом окне Свойства нажмите кнопку Метки пиков. Откроется диалоговое окно Метки пиков. f Снимите все флажки Метки пиков, кроме ВУ (время удерживания). Снимите флажок Отображать имена меток и нажмите кнопку ОК. g В диалоговом окне Свойства нажмите кнопку Применить и посмотрите, как изменились метки пика.	

4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
9	Отобразите справа хроматограмму квалификатора до и после нормализации.	
	а Перейдите на вкладку Сведения о соединении (2). Установите флажок Нормализовать в разделе Квалификаторы. б Нажмите кнопку Применить и посмотрите, что теперь эти два пика сливаются и отображаются как один пик.	Для версии V.04.01 и выше: Обратите внимание на то, что по умолчанию отображается нормализованный пик квалификатора, наложенный на пик квантификатора.
		
	с В диалоговом окне Свойства снимите флажок Нормализовать квалификаторы. д Нажмите кнопку Применить, чтобы снова отобразить второй пик квалификатора для квалификатора.	
		

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
10 Просмотрите интервал неопределенности.	a В раскрывающемся меню поля Интервал неопределенности диалогового окна Свойства выберите тип интервала неопределенности, который хотите отображать. Нажмите кнопку Применить, и на хроматограмме квалификатора появится интервал неопределенности. b В раскрывающемся меню Интервал неопределенности диалогового окна Свойства выберите пункт Не отображать. Нажмите кнопку Применить, чтобы убрать интервал неопределенности с хроматограммы. c Нажмите кнопку ОК, чтобы закрыть диалоговое окно Свойства. d Сравните хроматограмму квалификатора с интервалом неопределенности и без него.	Интервал неопределенности — это указанный пунктирными линиями диапазон, который показывает верхнюю и нижнюю границы интенсивности квалификатора.
	 	
11 Удалите столбцы Инт. и Парам. инт. из окна Таблица серии .	a Нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию. В пользовательском интерфейсе Quant-MY-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию. b Щелкните правой кнопкой мыши в разделе Метод соединения окна Таблица серии и выберите Добавить/удалить столбцы. c В списке справа выберите Инт. и Парам. инт. (методы соединения). d Нажмите кнопку Удалить, затем кнопку ОК.	

Задание 3. Обнаружение выбросов

Это задание показывает, как выполнить точную настройку диапазона точности для соединения и скрыть или показать результаты с флагами выброса.

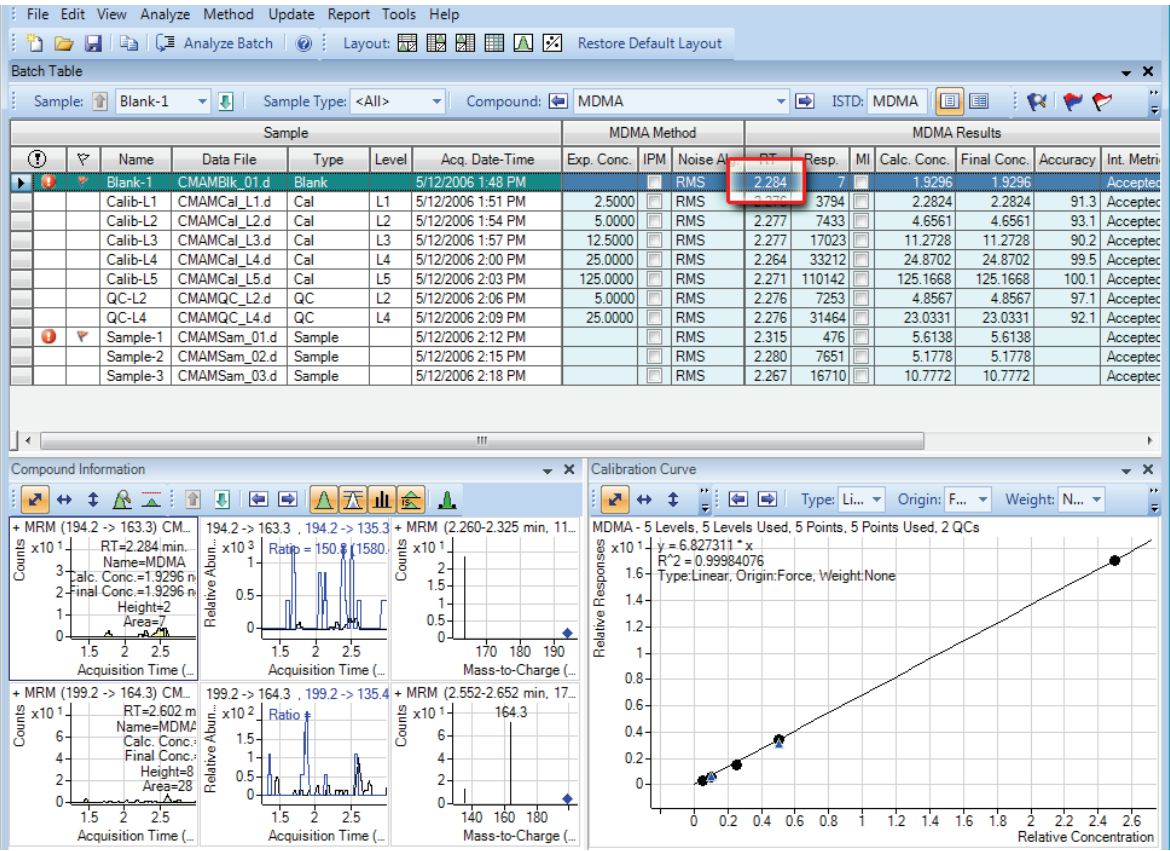
Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

1 Просмотрите сведения о выбросах для MDMA.

- a Щелкните значок **Следующее соединение** на панели инструментов в окне таблицы серии до тех пор, пока не появится соединение MDMA.
- b Выберите строку **Blank-1** и установите курсор на столбец **ВУ**, как показано в приведенном ниже примере.

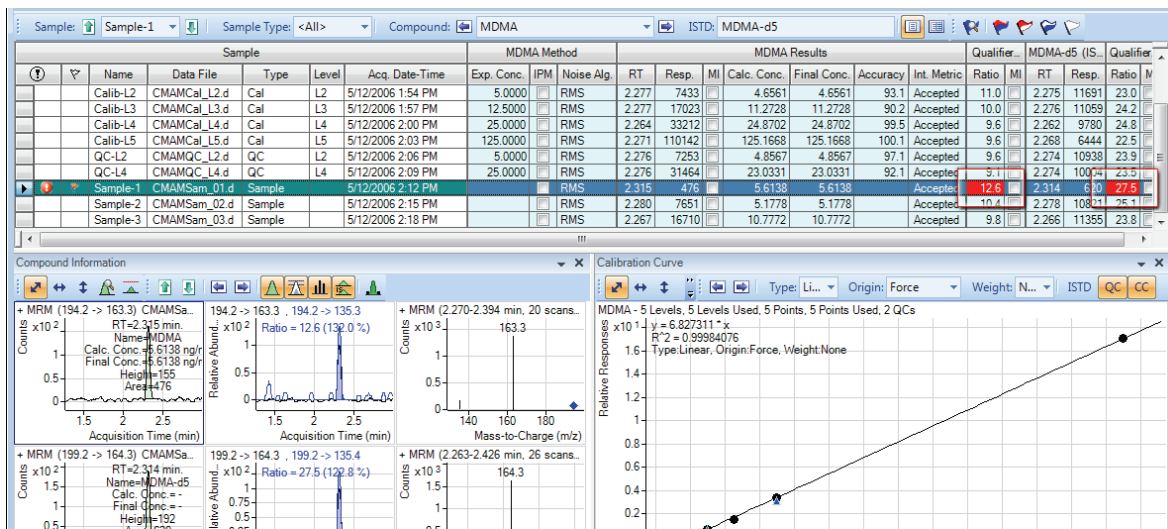


Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

- с Изучите сведения о выбросе в столбце **Квалификатор... Результаты > Отношение** для Sample 1, как показано на приведенном ниже рисунке.



- 2 Измените в методе диапазон точности для амфетамина и повторите анализ серии.

- а Щелкайте значок **Предыдущее соединение** на панели инструментов до тех пор, пока не появится соединение **Амп.**
- б Выберите в таблице строку **Calib-L5.**
- с Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить в режим редактирования метода.
- В пользовательском интерфейсе **Quant-Mu-Way** во вкладке **Метод** щелкните **Правка.**
- д В столбце **Задачи метода** щелкните **Задачи отладки выбросов > Точность.**
- е Установите параметр **Макс. % откл. точности**, равным **5 %** для **Амп.**

Окно **Таблица метода** можно разделить, перетаскив влево маленький прямоугольник слева от полосы прокрутки. В приведенном ниже примере окно **Таблица метода** разделено с помощью прямоугольника рядом с нижней полосой прокрутки. Сведения в обеих частях одни и те же. С помощью этих двух панелей можно просматривать две части таблицы одновременно.

4 Использование трех инструментов для оценки результатов
Задание 3. Обнаружение выбросов

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
------	----------------------	-------------

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - [New Method]

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch Layout: [Icons] Restore Default Layout

Method Tasks

Method Setup Tasks

MRM Compound Setup

Retention Time Setup

ISTD Setup

Concentration Setup

Qualifier Setup

Calibration Curve Setup

Globals Setup

Save / Exit

Validate

Save

Save As...

Exit

Manual Setup Tasks

Outlier Setup Tasks

Accuracy

Qualifier Ratio

Retention Time

Relative Retention Time

Method Table

Time Segment: <All> Compound: Amp-d5 Reset Table View

Sample		Acq. Date-Time	Data File
Calib-L5		5/12/2006 2:03 PM	CMAMCal_L5.d

Quantifier		Scan	Type	Accuracy Max. % Dev.	LOQ Accuracy Multiplier
Amp	4	MRM	Target	5.0	1.0
Amp-d5	4	MRM	ISTD	20.0	1.0
Cocaine	2.0	MRM	Target	20.0	1.0
Cocaine-d3	5.0	MRM	ISTD	20.0	1.0
MDMA	3.2	MRM	Target	20.0	1.0
MDMA-d5	4.3	MRM	ISTD	20.0	1.0
Meth	9.3	MRM	Target	20.0	1.0
Meth-d5	3	MRM	ISTD	20.0	1.0

< [Icons] >

4 Compounds (4 total) 4 ISTD (4 total)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
f	В столбце Задачи метода нажмите Сохранить/Выйти > Выход , затем выберите Нет в разделе Дополнительная обработка серии после применения метода и нажмите кнопку Да в ответ на запрос Применить этот метод к серии?	Окно Таблица серии можно разделить на две части. По умолчанию положение столбцов Проба зафиксировано, и прокручивать можно только остальные столбцы. Разделив таблицу на две части, можно определить, какие столбцы отображаются в каждой из них. Нужно снять флажок в пункте Блокировать столбцы пробы контекстного меню таблицы серии, чтобы можно было разделить окно Таблица серии.
g	Нажмите клавишу F5, чтобы выполнить анализ серии. Теперь в столбце Точность для амфетамина появились красные (высокие) и синие (низкие) значения выброса	

Name	Data File	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT
Sample-1	CMAMSam_01.d					
Sample-2	CMAMSam_02.d	4.8422		31.0		2.130
Sample-3	CMAMSam_03.d	14.1047		25.3		2.089
Sample-added	CMAMSam_added.d					
QC-L2	CMAMQC_L2.d	5.1	103.7	27		2.131
QC-L4	CMAMQC_L4.d	27.6	110.6	25		2.121
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	3.2	131.6	24		2.129
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	5.7	114.1	33		2.128
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	13.5	108.5	26		2.121
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	26.5	106.2	29		1.990
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	124.5	99.6	27		2.076

4 **Использование трех инструментов для оценки результатов**
Задание 3. Обнаружение выбросов

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 С помощью следующего набора значков для флагов выбросов 	a На панели инструментов щелкните значок Показать строки с высокими выбросами  , чтобы отобразить только пробы с высокими выбросами. b Щелкните значок Выключить фильтр выбросов  , чтобы отобразить все пробы. c На панели инструментов щелкните значок Показать строки с высокими/низкими выбросами  , чтобы отобразить только пробы с высокими или низкими выбросами. d Щелкните значок Показать строки с высокими/низкими выбросами  еще раз, чтобы отобразить все пробы. e Щелкните значок Выбор выбросов  , чтобы открыть диалоговое окно Выбросы. f Снимите флажки Точность и Время удерживания и нажмите кнопку ОК. g Щелкните значок Выбор выбросов  , чтобы открыть диалоговое окно Выбросы. h Установите флажки Точность и Время удерживания и нажмите кнопку ОК.	Обратите внимание на то, что для восстановления в окне Таблица серии просмотра всех файлов данных, с выбросами и без выбросов, нужно просто щелкнуть еще раз значок, выбранный для фильтрации выбросов.



Упражнение 5

Формирование отчетов о количественном анализе

Это упражнение помогает научиться выполнять следующие задачи:

- формировать методы отчетов с помощью одного или нескольких шаблонов отчета;
- формировать отчет.

В этом упражнении используется серия **DrugsOfAbuse**. Те же самые задачи можно выполнить с файлами данных Triple Quad, Q-TOF и TOF.

Каждое упражнение представлено в виде таблицы, состоящей из трех столбцов:

- Шаги — следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции — используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения.
- Комментарии — здесь представлены советы и дополнительная информация о каждом этапе упражнения.

Разрабатываемый метод отчета определяет отчет, создаваемый в приложении MassHunter. Методы отчета создаются из одного или нескольких шаблонов отчета, объединенных вместе и отредактированных в соответствии с потребностями отчетности. Для разработки отчетов можно использовать шаблоны либо в формате Excel, либо в формате PDF. Шаблоны PDF, входящие в эту версию, позволяют формировать отчеты в 20 раз быстрее, чем при использовании шаблонов Excel. Кроме того, они обладают множеством параметров расширяемости и быстродействия.

В этом упражнении вы сначала разработаете метод отчета с помощью шаблонов PDF, а затем, используя его, создадите отчеты по одной пробе и серии.



Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте файл серии <i>iii_Test_01.batch.bin</i> .	a Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок Количественный анализ (QQQ) на рабочем столе. b Щелкните значок Открыть серию  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно Открыть серию. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Открыть серию. c Перейдите в папку \Ваш каталог\DrugsOfAbuse и щелкните файл <i>iii_Test_01.batch.bin</i>.	• Если серия уже открыта, пропустите этот шаг и перейдите к шагу 2. • Эту программу также можно запустить, выбрав Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ) в меню Пуск. • Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку Восстановить макет по умолчанию на панели инструментов, прежде чем открывать серию. Restore Default Layout • В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Вид щелкните Восстановить макет по умолчанию.
2 Выполните количественный анализ пробы этой серии и сохраните результаты.	a При открытой таблице серии нажмите кнопку Анализировать серию на панели инструментов, чтобы сформировать результаты. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Анализировать серию. b Выберите Файл > Сохранить, чтобы сохранить серию.	• Отчеты о количественном анализе содержат сведения о пробах, сформированные во время анализа серии. Функция составления отчетов не будет работать до тех пор, пока не будет выполнен количественный анализ проб и сохранены результаты. • Если количественный анализ серии уже выполнен, пропустите этот шаг и переходите к шагу 3.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Создайте метод отчета в формате PDF.	a На панели инструментов выберите Отчет > Сформировать. В пользовательском интерфейсе Quant-My-Way во вкладке Главная щелкните Создание отчета. Откроется диалоговое окно Формирование отчета. b Примите используемую по умолчанию Папку отчета для этого отчета. c Нажмите кнопку Создать в поле Метод отчета, чтобы создать новый метод отчета. d Нажмите кнопку Добавить шаблон в диалоговом окне Правка метода отчета, чтобы открыть браузер. e Перейдите в каталог MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting, выберите DrugAnalysis.report.xml и нажмите кнопку Открыть. Программа добавит шаблон в поле Шаблон на панели Правка метода отчета. f Повторите шаги d и e, чтобы добавить шаблон DrugAnalysis_DopingScreening.report.xml.	- В поле Папка отчета можно изменить каталог назначения для сохранения отчета. - Программная функция правки метода отчета позволяет объединять существующие шаблоны в метод отчета для разработки отчета в формате Excel или PDF либо в обоих форматах. - По умолчанию система использует последний метод отчета, с помощью которого был сформирован последний отчет. Вместо того чтобы формировать новый метод отчета, можно использовать метод по умолчанию, если он подходит, либо выбрать другой существующий метод. - Чтобы выбрать существующий метод отчета, нажмите кнопку Выбрать в поле Метод отчета и перейдите в папку, чтобы выбрать метод.
4 Отредактируйте метод отчета, чтобы создать PDF-отчеты по одной пробе или серии.	a В диалоговом окне Правка метода отчета выберите пункт Одна проба в раскрывающемся меню поля Режим отчета для строки шаблона DrugAnalysis.report. b Выберите пункт Серия в раскрывающемся меню поля Режим отчета для строки шаблона DrugAnalysis_Doping Screening. report. c Выберите язык в раскрывающемся меню поля Язык. d Выберите размер бумаги в раскрывающемся меню поля Размер бумаги.	- Диалоговое окно Правка метода отчета позволяет редактировать определенные функции шаблона, выбираемые для включения в метод отчета. - Функция составления отчетов в формате PDF позволяет создавать отчеты на английском, китайском или японском языке. Отчеты в формате Excel предоставляются только на английском языке, поэтому данный параметр будет затенен. - В отчетах Excel имеются ограничения на размер бумаги. В отчетах PDF предусмотрен выбор вариантов. - Кроме того, можно выбрать Формат публикации. Для отчетов в формате PDF доступен только один формат публикации, поэтому данное поле затенено в этом примере.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Выберите способ обработки результатов отчета системой.	a Выберите вкладку Результаты в окне Правка метода отчета. b Нажмите Авто в поле Формировать файл результатов отчета. c Выберите пункт QQQ в раскрывающемся меню поля Инструмент.	• В большинстве случаев рекомендуется использовать вариант Авто. При этом файл отчета будет формироваться в формате Excel только в тех случаях, когда выбран отчет в формате Excel. Отчеты в формате PDF формируются быстро и эффективно, когда в формировании файла Excel нет необходимости.
6 Задайте параметры графиков для метода.	a Откройте вкладку Параметры графиков, чтобы посмотреть параметры графиков. b Установите флажок Формировать файлы графиков, чтобы добавить графики в отчет. c В остальных полях параметров графиков оставьте значения по умолчанию.	• Вкладка Параметры графиков позволяет задавать внешний вид графиков в отчете путем редактирования в разделах Наложение хроматограмм квантификатора/квалификатора, Спектры, Хроматограмма пробы, Калибровочные кривые и Параметры графиков с фиксированным диапазоном. Если не изменить эти параметры, программа предоставит параметры по умолчанию, подходящие для данных.
7 Сохраните метод отчета.	a Щелкните значок сохранения в окне Правка метода отчета. b Присвойте методу отчета имя DOA.m.	• Прежде чем можно будет закрыть окно и сформировать отчет, необходимо сохранить метод.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Закройте окно Правка метода отчета .	Выберите Сохранить/Выйти , чтобы закрыть диалоговое окно Правка метода отчета и вернуться в окно Формирование отчета .	

The screenshot shows the 'Generate Report' dialog box. It has the following fields and controls:

- Batch file:** A text field with the value 'DOA_Demo.batch.bin' and a 'Browse...' button to its right.
- Batch folder:** A text field with the value 'C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\'. Below it is another text field with the value 'C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantReports\DOA_Demo-60' and a 'Browse...' button.
- Report folder:** A text field with the value 'C:\MassHunter\Report Templates\Quant\PDF-Reporting\DOA.m'. Below it are three buttons: 'Choose...', 'New...', and 'Edit...'.
- Samples/Compounds:** Two checked checkboxes: 'All samples' and 'All compounds'. To the right of each is a button: 'Choose samples...' and 'Choose compounds...'.
- Generate:** Two radio buttons: 'Generate reports now' (selected) and 'Queue report task'. Below them is a checked checkbox 'Start Queue Viewer'.
- At the bottom right are 'OK' and 'Cancel' buttons.

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
9 Сформируйте отчет с помощью метода	a Убедитесь в том, что только что созданный метод указан в поле Метод отчета b В поле Пробы/Соединения снимите флажок Все пробы, чтобы открыть таблицу серии. c Выберите одну из проб в окне таблицы серии и нажмите кнопку ОК. d Установите флажок Все соединения, чтобы отображать все соединения в выбранной пробе. e Выберите переключатель Сформировать отчеты сейчас и нажмите кнопку ОК, чтобы сформировать отчет.	- В отчете можно показывать все пробы и все соединения серии либо определенные пробы или соединения, выбранные в таблице серии. - Отчеты в формате PDF формируются быстро, поэтому выбор Сформировать отчеты сейчас — это лучший вариант для немедленного получения отчета. Если наряду с отчетом формируется файл Excel, то можно выбрать переключатель Поставить в очередь задачу отчета, чтобы наблюдать за процессом формирования отчета. - Все формируемые отчеты отображаются в средстве просмотра. Самый последний отчет отображается вверху списка. - Просмотр и печать отчетов осуществляются из созданного файла Excel или PDF.
10 Просмотрите отчет.	Дважды щелкните файл, чтобы открыть и вывести на экран отчет.	Или же отчет можно открыть, выбрав файл в проводнике Windows.

Name	Date modified	Type	Size
 DrugAnalysis_000_CMAMBIk_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	95 KB
 DrugAnalysis_001_CMAMCal_L1.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_002_CMAMCal_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_003_CMAMCal_L3.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_004_CMAMCal_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_005_CMAMCal_L5.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_006_CMAMQC_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_007_CMAMQC_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_008_CMAMSam_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	98 KB
 DrugAnalysis_009_CMAMSam_02.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_010_CMAMSam_03.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	166 KB



Справочная информация

Десять главных возможностей	90
Методы количественного анализа	94
Непараметрический интегратор	95
Краткий обзор серии: результаты	97
Краткий обзор соединений	98
Подтверждение соединения	100
Калибровка соединения	101



Десять главных возможностей

Десять главных возможностей программы Quantitative Analysis, которые помогают интегрировать, количественно определять и просматривать данные с помощью простых и мощных средств:

Краткий обзор серии: Отладка таблицы серии

- Новая серия — создание таблицы серии, в которой можно выполнять операции с пробами и соединениями, оставаясь в одном представлении.
- Анализировать — воссоздание калибровочной кривой и повторный количественный анализ всех проб с помощью текущего открытого метода.
- Определить количественно — применение существующей калибровочной кривой к текущей серии, пробе или соединению

Уровень детализации применения количественного анализа позволяет быстро манипулировать конкретным сигналом.

- Интегрировать — интегрирование сигналов текущей серии, пробы или соединения.

Редактор методов

- Отладка MRM — представление метода количественного анализа в простом пошаговом виде.
- Создание метода из полученных данных MRM — автоматическое создание метода количественного анализа на основе метода сбора данных, для чего нужно только назначить взаимосвязь между внутренним стандартом и концентрациями.
- Создание метода вручную с помощью графиков в окне сведений о пробе.
- Группировать по временному сегменту — систематизация методов по соединениям в упорядоченных по времени сегментах.
- Валидировать — обеспечение соответствия метода строгим критериям.
- Изотопное разбавление — поддержка коррекции на основе расчета констант Колби (Rx, Ry).

Калибровка

- Помощник аппроксимации кривой — расчет всех комбинаций кривых, выбор отключенных точек и предоставление результатов, которые можно сортировать по доверительному интервалу и фильтровать по R^2 , стандартной ошибке и макс. % остатка.

- Помощник по разбавлению — расчет и создание уровней калибровки на основе используемой по умолчанию или заданной схеме последовательного разбавления.
- Копировать уровни калибровки — копирование уровней калибровки из одного соединения в другие соединения.
- Отключить точки калибровки — отключение точек калибровки на основе уровня, или отдельных соединений в таблице, или в интерактивном режиме посредством графиков.
- Аппроксимации кривой — поддерживает следующие параметры для кривых:
 - Тип: Линеинная, Квадратичная, ln первого порядка, ln второго порядка, Среднее коэффициентов отклика;
 - Начало координат: Игнорировать, Включить, Принудительно, Смещение по холостой;
 - Вес: Нет, $1/x$, $1/x^2$, $1/y$, $1/y^2$, Log, $1/SD^2$.
- Замена кривой — создание калибровочных кривых на основе существующих калибровочных проб.
- Усреднение повторов — усреднение повторяющихся уровней в таблице калибровки метода.
- Импорт уровней — импорт уровней калибровки и концентраций из файла.
- Изменение масштаба графиков — представление графиков с возможностью автоматического изменения масштаба по осям X, Y, X-log и Y-log и интеллектуального масштабирования в соответствии с заданными уровнями.

Интегратор

- Интеграторы Agile и Agile2 — предоставление на всех уровнях сигналов непараметрического интегратора, который снижает потребность в интегрировании вручную.
- Метрики интегратора — формирование метрик, которые характеризуют интегрирование сигналов, для принятия, проверки или отклонения интегрирования.
- Соотношение сигнал-шум — расчет соотношения сигнал-шум для пиков.
- Графики — обеспечение превосходной взаимосвязи между графическим отображением соединений и отображением сведений о пиках.

Краткий обзор серии: результаты

- Навигация — перемещение (к предыдущему или следующему элементу либо непосредственно к элементу) между пробами, соединениями, временными сегментами и группами соединений.

- Представления соединений — переключение между подробными сведениями о текущем соединении/пробе и сводными данными нескольких соединений/проб.
- Представления таблицы серии — возможность использования макетов простых таблиц либо вертикально или горизонтально вложенных таблиц, содержащих подробные данные и макет таблицы соединения.
- Макет окна — преобразование экрана в соответствии со значениями по умолчанию либо сохранение или загрузка пользовательских макетов окна.
- Автообзор — автоматическое и интерактивное отображение каждой пробы с возможностью остановки в любое время для более тщательного изучения.
- Столбцы — добавление, удаление, переупорядочение, сохранение, загрузка, восстановление или сброс столбцов.
- Плавающая панель — перемещение любой панели на другой монитор для создания двухмониторных представлений.
- Экспорт таблицы — экспорт краткой обзорной таблицы серии непосредственно в файлы Excel.
- Экспорт графиков — экспорт любого графика в множество форматов с изменяемым размером.
- Копировать/Вставить — копирование или вставка любого графика непосредственно в приложения Microsoft Office, например, в Word, PowerPoint, Excel и т. д.
- Печать/Предварительный просмотр — печать или предварительный просмотр содержимого экрана в формате WYSIWYG (что видишь, то и получишь).
- Фильтр — отображение любого сочетания типов пробы.
- Сортировка — сортировка любого столбца, отображаемого в таблице.

Краткий обзор соединений: результаты

- Печать/предварительный просмотр — печать или предварительный просмотр хроматограмм соединений.
- Копировать/Копировать страницу — копирование выбранных хроматограмм соединений или всех хроматограмм соединений, отображаемых на экране, в приложения Microsoft Office, например в Word, PowerPoint, Excel и т. д.
- Правка хроматограмм соединений — интегрирование данных вручную или выбор соединений с нулевым пиком.
- Представления — отображение подробных данных хроматограмм, например базовых линий, залитых пиков.
- Регулировка осей — связывание/отмена связывания осей X или Y, автоматическое масштабирование по размеру панелей, подбор размера в соответствии с пиками или уровнями калибровки.

- **Макет** — упорядочение строк по соединениям или пробам, выбор наложений хроматограмм, просмотр пробы за пробой или соединения за соединением, задание параметров отображения.
- **Выделение** — соединения с выбросами.

Обнаружение выбросов

- **Управление** — установка и выбор определенных выбросов, которые можно обнаруживать и по отдельности регулировать.
- **Выделение** — выделение значений выбросов (высокое — красным цветом, низкое — синим цветом) в таблице результатов.
- **Фильтры** — отображение результатов, отфильтрованных с помощью выбранных типов фильтров.
- **Выбросы** — поддержка выявления выбросов в определенных типах данных.
- **Сообщения о количественном анализе** — предупреждение о пробах, во время количественного анализа которых возникли серьезные проблемы.

Отчет

- **Формировать** — формирование графиков и результатов отчета для импорта и форматирования в Excel XML.
- **Настройка** — возможность настройки шаблона в формате Excel.
- **Функция составления отчетов в формате PDF** — позволяет создавать настраиваемые отчеты в формате PDF.

Обновить

- **Обновить/Усреднить ВУ** — обновление или расчет взвешенных средних значений времен удерживания соединений.
- **Обновить отношения квалификаторов** — обновление отношений квалификаторов на основе текущей пробы соединения.
- **Обновить назначения массы** — обновление назначений массы на основе текущей пробы соединения.

Качественный

- **Сведения о пробе** — отображение хроматограммы и извлеченных спектров для текущей пробы.
- **Хроматограмма/Спектр** — предоставление важных функциональных возможностей для исследования спектров сигналов различных типов.

Методы количественного анализа

Редактор методов позволяет создавать новый метод количественного анализа из полученного файла данных MRM (Рис. 12), данных SIM, полученного файла данных сканирования или вручную.

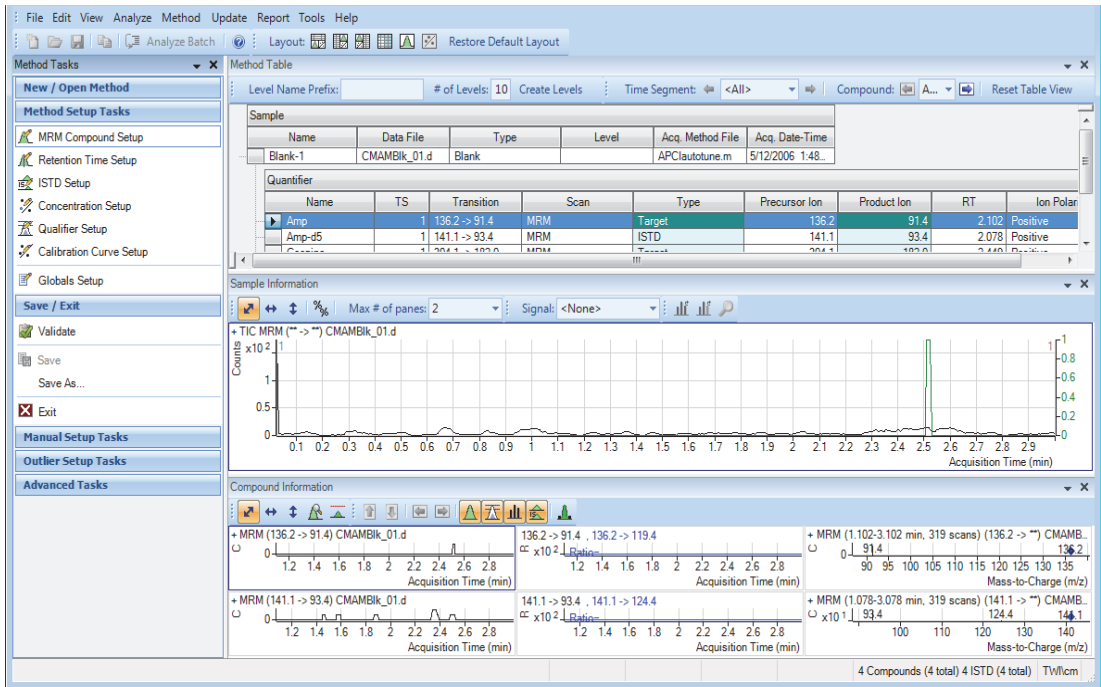


Рис. 12 Количественное представление — редактор методов

Файл, выбранный в таблице серии, используется в качестве эталона для разработки параметров метода. Затем с помощью этих параметров формируется калибровочная кривая и выполняется количественный анализ стандартов, проб для контроля качества и анализируемых проб.

Непараметрический интегратор

Что такое непараметрический интегратор?

Компания Agilent разработала новый алгоритм интегратора пиков, который особенно эффективен для данных МС/МС. Преимущества непараметрического интегратора:

- Обработка данных сигнала низкого уровня с помехами путем статистической установки начальной и конечной точек пика.
- Автоматическая регулировка порога.
- Избавление от необходимости повторного интегрирования пиков вручную для сигналов MRM низкого уровня.
- Выявление надежных пиков и пиков, которые следует отбросить.

Пример результатов интегрирования

На Рис. 13 показаны данные с двумя экстремумами.

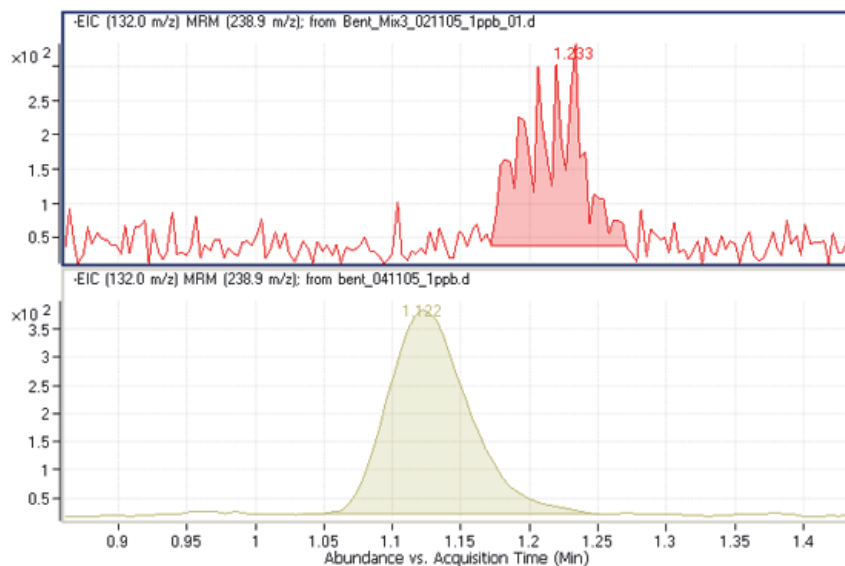


Рис. 13 Непараметрический интегратор — данные с двумя экстремумами

Нижний пик хроматограммы нетрудно интегрировать, так как это хороший пик гауссовой формы, но определить базовую линию верхнего пика сложно. Действительно, многие алгоритмы интегратора могли бы интерпретировать эти результаты как несколько пиков.

Однако новому алгоритму компании Agilent не составило никакого труда определить базовую линию и распознать этот одиночный пик. На самом деле новый алгоритм интегратора интерпретировал бы эти данные как один пик, даже если базовая линия была бы восходящей, а не горизонтальной, как на рисунке.

Краткий обзор серии: результаты

Результаты интегрирования, полученные во время анализа амфетамина (Amp), показаны на Рис. 14. Это неструктурированное представление окон **Таблица серии**, **Сведения о соединении** и **Калибровочная кривая**.

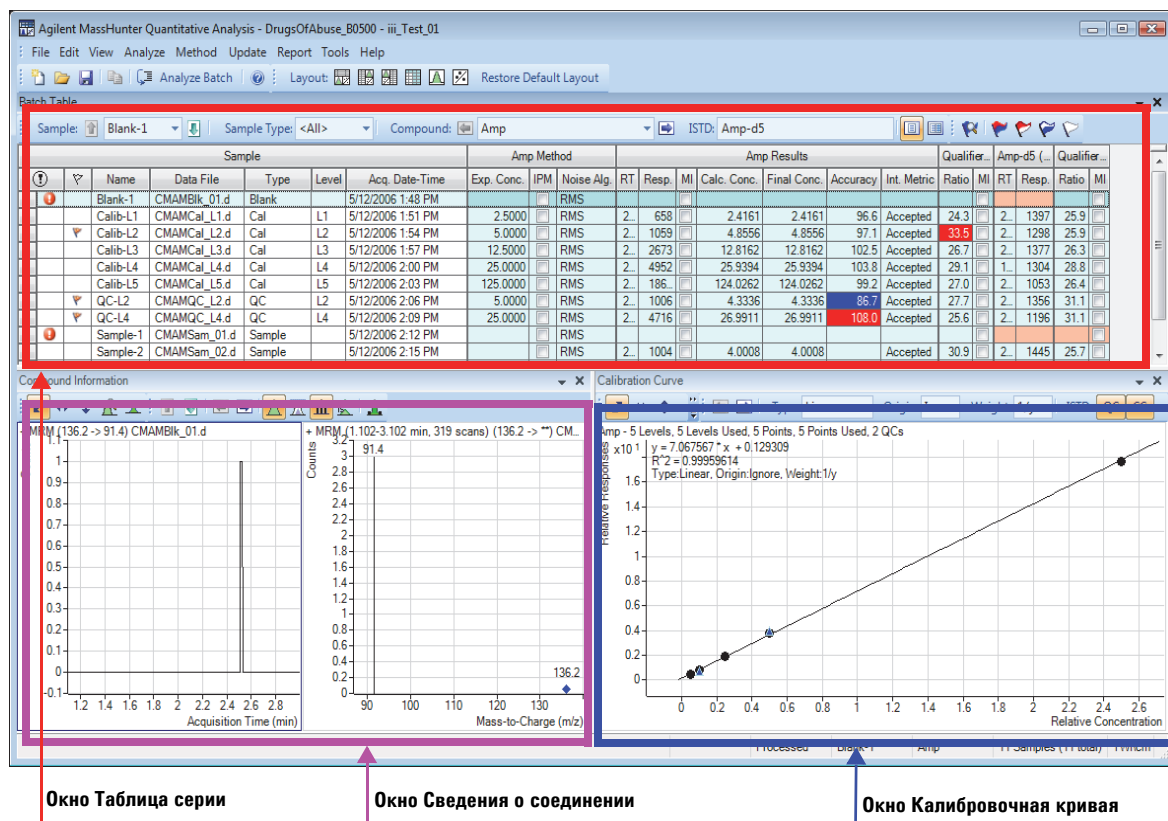


Рис. 14 Результаты по амфетамину

- В окне **Таблица серии** показаны результаты интегрирования, полученные применением метода количественного анализа к каждому файлу данных. Выделения цветом соответствуют результатам, которые ниже (синий) или выше (красный), чем ожидалось.
- В расположенном внизу слева окне **Сведения о соединении** отображаются интегрированные хроматографические пики.
- Внизу справа расположено окно **Калибровочная кривая**.

Краткий обзор соединений

В кратком обзорном представлении соединений отображаются определенные соединения, обнаруженные в каждой пробе, как показано на Рис. 15. Эта функция позволяет просматривать хроматограммы соединений и усреднять их для упрощения анализа данных. Она особенно полезна в лабораториях, занимающихся безопасностью пищевых продуктов и выявляющих тренды соединений в сериях проб.

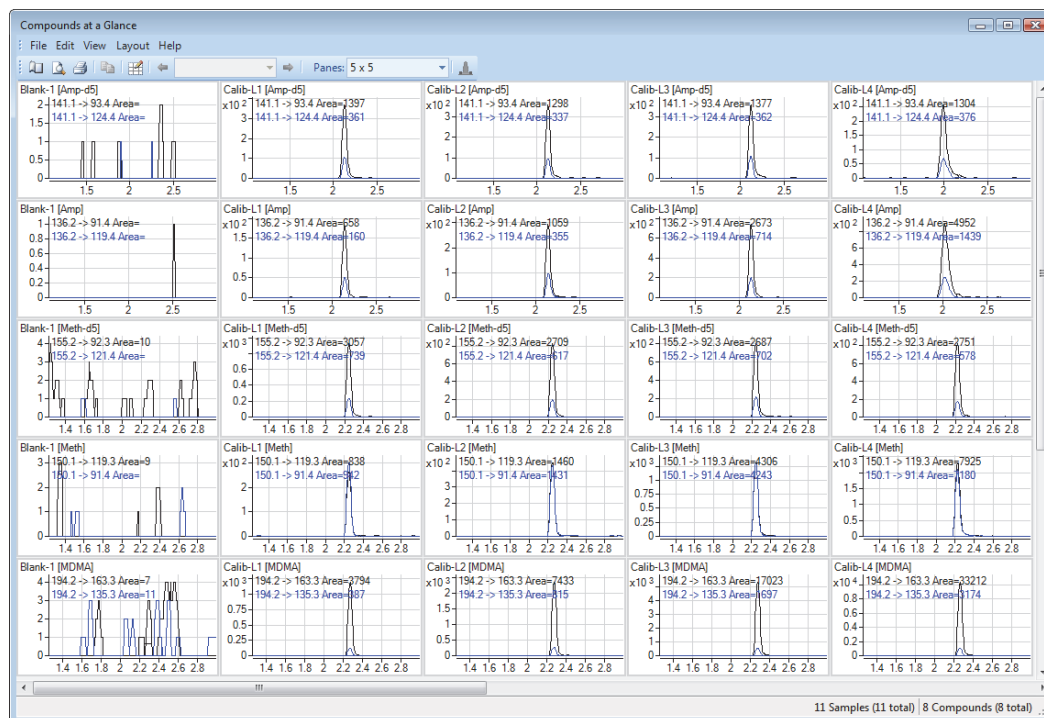


Рис. 15 Краткий обзор функции «Соединения навскидку» в программе Quantitative Analysis

Функция «Соединения навскидку» позволяет выбирать соединения и пробы, выводимые на экран. Как показано на Рис. 16, различные вкладки сверху окна **Отладка графиков** предоставляют различные варианты выбора и упорядочения хроматограмм.

- На вкладке **Пробы** перечислены все пробы, включенные в серию, и представлены средства выбора всех проб или определенных проб.

- На вкладке **Соединения** перечислены соединения, обнаруженные в серии. Она позволяет выбирать соединения для просмотра.
- Вкладка **Упорядочить** позволяет задавать расположение хроматограмм в соответствии с пробой или соединением. На ней предусмотрены возможности наложения соединений, проб и выбросов. Эта вкладка позволяет выбирать варианты регулировки хроматограмм, например отображение базовых линий или заливки пиков, чтобы лучше иллюстрировать тенденции обнаружения пиков.
- На вкладке **Выброс** представлены параметры для отображения выбросов в данных.

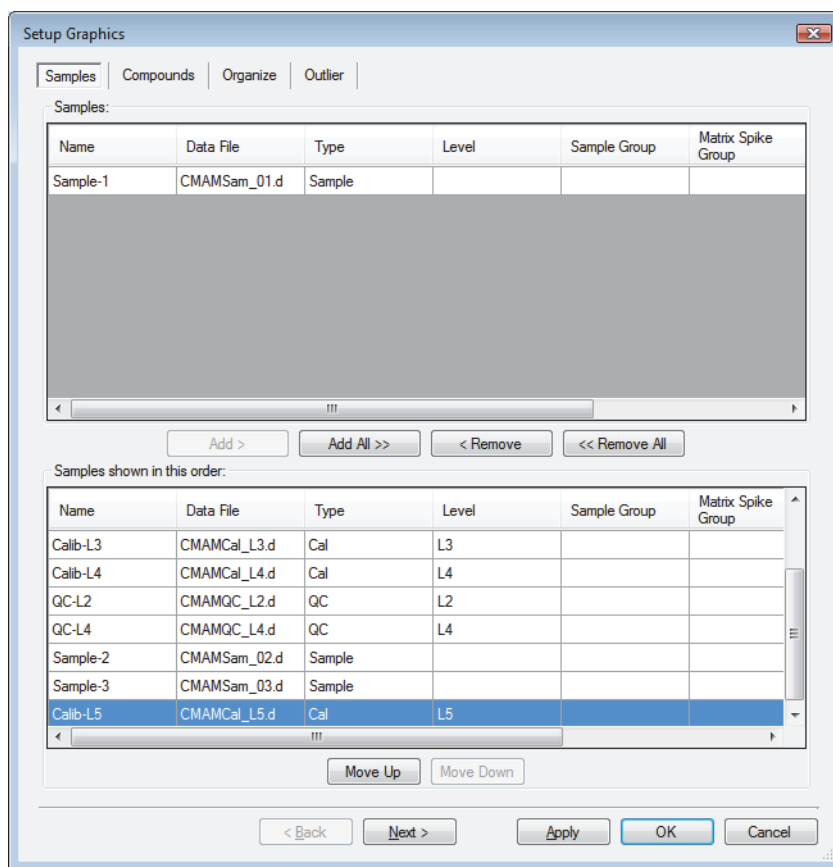


Рис. 16 Варианты отладки для функции «Соединения навскидку»

Подтверждение соединения

Формат, показанный на Рис. 17, может оказаться полезным для сертифицированных лабораторий наркологической экспертизы. В нем представлены два набора графиков, которые можно получить при анализе на ТГК.

Наложение иона-квантификатора и иона-квалификатора

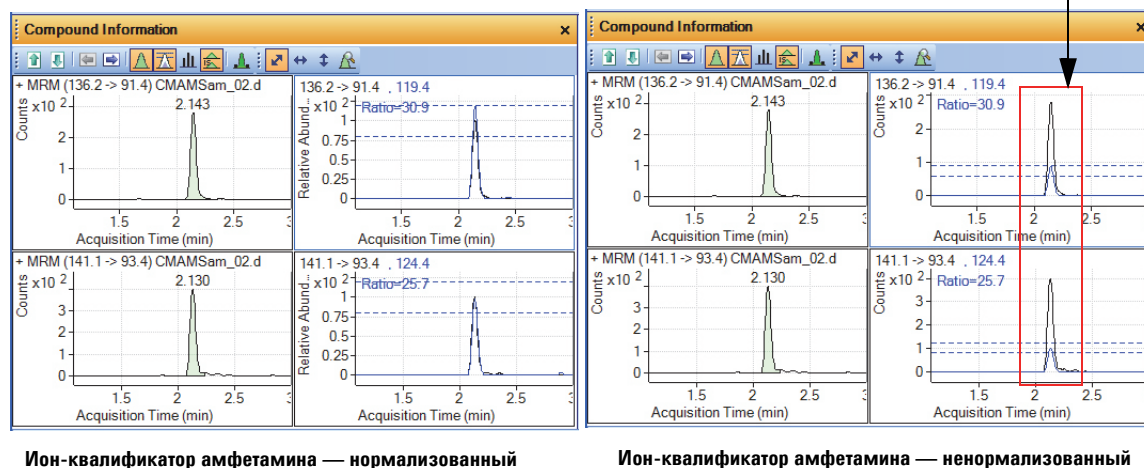


Рис. 17 Амфетамин в программе Quantitative Analysis

Для подтверждения необходимо получить два дочерних иона: ион-квантификатор и ион-квалификатор. Обычно ионом-квантификатором, используемым для количественного анализа, является наиболее интенсивный ион из двух дочерних ионов.

Для того чтобы можно было подтвердить присутствие амфетамина, площадь пика иона-квалификатора должна составлять не менее определенного процента от иона-квантификатора, заданного в методе количественного анализа. В данном примере используется значение 26,5 % с допустимым отклонением ± 20 %. Это означает, что для определяемого вещества, амфетамина, площадь пика иона-квалификатора должна составлять от 21,2 до 31,8 % от площади пика иона-квантификатора. У квалификатора для внутреннего стандарта, или Amp-d5, также имеется определенный диапазон, в котором он должен находиться.

На рисунке слева трудно определить, находится ли ион-квалификатор в пределах допустимого отклонения, так как размер пика квалификатора нормализован с коэффициентом 1/0,265. На рисунке справа центр диапазона с допустимыми

отклонениями находится в точке, где площадь составляет 26,5 % от площади пика иона-квантификатора, и ион-квалификатор изображен ненормализованным, т. е. в том же масштабе, что и квантификатор. Если ион выходит за пределы диапазона с допустимыми отклонениями, то он затушевывается синим цветом, но остается достаточно прозрачным, чтобы не заслонять ион-квантификатор. Так проще визуальнo убедиться в присутствии соединений.

Калибровка соединения

Программа Quantitative Analysis содержит ряд инструментов, помогающих калибровать и количественно оценить соединения:

- Помощник аппроксимации кривой
- Отображение сведений о точке данных при наведении курсора
- Масштабирование точек данных

Помощник аппроксимации кривой

Помощник аппроксимации кривой обеспечивает аналитическое представление оценки возможных приближений кривой (Рис. 18).

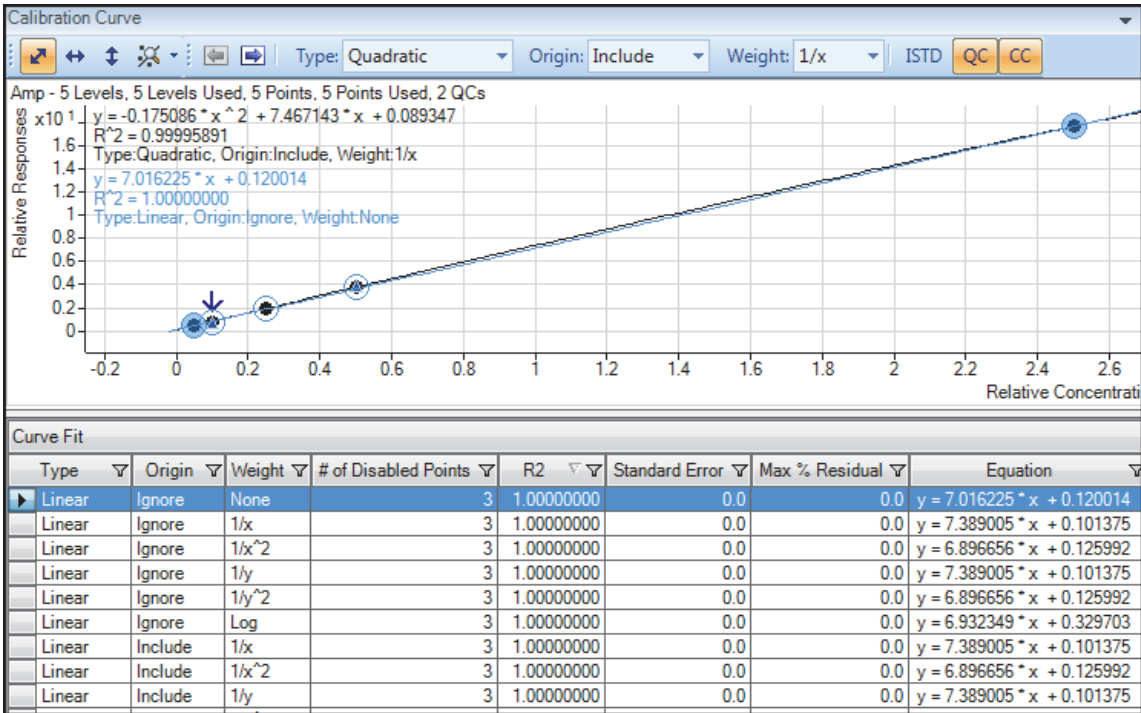


Рис. 18 Помощник аппроксимации кривой

Обратите внимание на то, что черная линия, проведенная через точки данных, построена с использованием следующих настроек: Тип – Квадратичная, Вес – $1/x$, Начало координат – Включить. Ниже калибровочной кривой перечислено множество других комбинаций параметров кривой, причем выбранная комбинация выделена синим цветом. Кроме того, выбранные параметры представлены графически синим цветом в окне кривой.

Можно найти наилучшую аппроксимацию кривой, например соответствующую максимальному значению R^2 . Для этого упорядочите все возможные результаты в порядке убывания значения R^2 , а затем решите, сколько точек данных считать выбросами.

Например, первый набор параметров в списке соответствует следующим параметрам: Тип – Линейная подгонка, Начало координат – Игнорировать, Вес – Равный. Соответствующее значение R^2 составляет 0,9998001477, что очень хорошо. Чтобы построить соответствующую кривую, просто щелкните эту запись в таблице.

Используя эти параметры, можно заново выполнить количественный анализ данных. В некоторых лабораториях устранение выбросов является обычной стандартной рабочей процедурой (SOP).

Сведения о точках данных

Перекрывающиеся точки данных — это вполне обычное явление для калибровочной кривой, особенно для данных тройного квадратурного МС, отличающихся довольно низкими значениями %отн.станд.откл. (Рис. 19). Чтобы легче было отличать одни точки данных от других, можно наводить курсор на точки данных и получать дополнительные сведения о них.

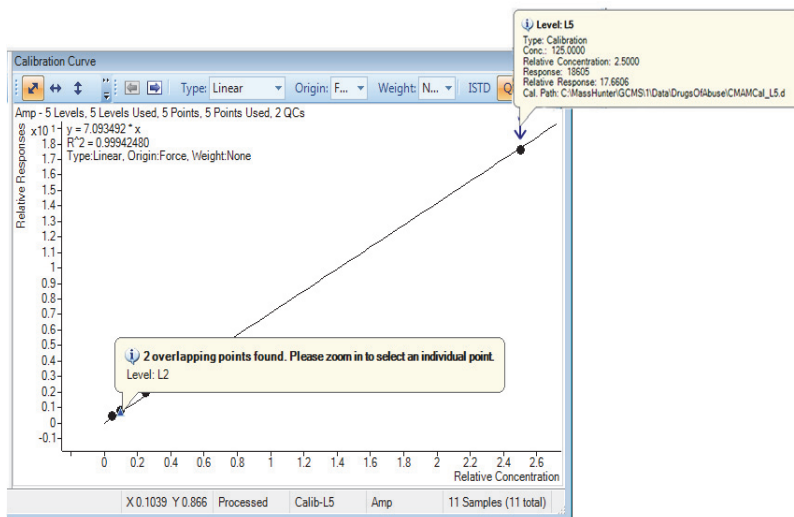


Рис. 19 Результаты по амфетамину: сведения о точках данных калибровки

На этом рисунке приведены два примера сведений такого типа. В первом примере показано, что точки данных наложены друг на друга, и рекомендуется увеличить изображение, чтобы увидеть их по отдельности. Во втором примере показаны сведения о самой точке данных.

Масштабирование точек данных

Наложенные друг на друга точки данных можно увеличить, чтобы увидеть отдельные точки данных, неразличимые в визуальном представлении.



© Agilent Technologies, Inc.
Напечатано в США, Сентябрь 2017 г.



G3335-98152