



ПО Agilent MassHunter Workstation

**Программа качественного
анализа**

**Руководство по
ознакомлению для
ГХ/МС**



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

G3335-98197

Издание

Редакция А, январь 2017 г.

Напечатано в США

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

Microsoft[®], Windows 7[®] и Excel[®] — охраняемые в США и/или других странах товарные знаки Microsoft Corporation.

Версия ПО

Это руководство подходит для программного обеспечения ПО Agilent MassHunter Workstation — программа качественного анализа версии В.08.00 и более поздних версий, пока не будет заменено.

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

ОСТОРОЖНО!

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 уяснены и выполнены.

ВНИМАНИЕ!

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 уяснены и выполнены.

В этом руководстве...

Руководство содержит информацию для обучения использованию ПО Agilent MassHunter Workstation – программа качественного анализа с данными ГХ/МС. Программное обеспечение Qualitative Analysis состоит из двух основных программ.

- Qualitative Analysis Navigator – используется для изучения хроматограмм и спектров, а также для определения ионов в масс-спектрах. Эта программа особенно полезна при узконаправленном, ручном изучении данных.
- Qualitative Analysis Workflows – содержит алгоритмы анализа, которые используются для обнаружения признаков соединений в имеющихся данных. В программе также есть алгоритмы определения, которые позволяют идентифицировать неизвестные соединения на основе обнаруженных признаков.

В каждой из программ используются различные окна. В обоих представлениях доступны следующие окна:

- Method Editor (Редактор методов)
- Difference Results (Разница результатов)
- Structure Viewer (Средство просмотра структуры)
- Formula Calculator (Калькулятор формул)
- Mass Calculator (Калькулятор масс)

Программа Qualitative Analysis Navigator

В этой программе с помощью окна навигатора по данным (Data Navigator) можно в диалоговом режиме выбирать различные спектры и хроматограммы. Можно создавать формулы для этих спектров, а также искать их в библиотеке или базе данных.

Если вы изучаете спектр, который извлекли вручную или с помощью алгоритма Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрирование и извлечение спектров пиков), используйте именно эту программу.

Программа Qualitative Analysis Workflow

Эта программа предназначена для работы с конкретным соединением на основе одного или нескольких файлов данных. Информация по одному конкретному соединению представлена в нескольких окнах. Изменить выбранное соединение можно в окне Compound List (Список соединений). Для перехода между различными файлами данных используется таблица проб (Sample Table).

Если вам необходимо выполнить какой-либо из алгоритмов анализа соединений (Compound Mining), используйте именно эту программу.

Если при работе с какой-либо из этих программ вам необходимо воспользоваться инструментами из другой программы, запустите эту программу с помощью меню запуска (Launch). Можно также указать, какие из открытых в данный момент файлов данных должны быть открыты в программе, которую вы запускаете.

Прежде чем приступить к упражнениям, прочтите инструкции, изложенные в разделе «[Перед выполнением упражнений...](#)» на стр. 9.

Упражнение 1 Знакомство с основами качественного анализа

В этом упражнении вы познакомитесь с некоторыми из множества полезных функций программы Qualitative Analysis Navigator. Выполнение этих заданий имеет большое значение независимо от того, какой тип данных используется.

Упражнение 2 Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

В этих заданиях вы будете находить и определять соединения в файлах данных ГХ/МС. Для анализа соединений используется программа Qualitative Analysis Workflows. В этой программе также можно определять соединения.

Упражнение 3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

В этих заданиях вы научитесь настраивать и выполнять рабочий процесс. Для выполнения каждого задания используется отдельный рабочий процесс.

Справка

В этом разделе пользователь ознакомится с основами использования программы качественного анализа.

Новые возможности

версии В.08.00

Перечисленные ниже возможности доступны и в программе Qualitative Analysis Navigator, и в программе Qualitative Analysis Workflows.

- Поддерживаются ОС Windows 10 и Windows 7.
- Поддерживается Microsoft Excel 2016.
- Упрощены меню и окна.
- Окна обозревателя методов (Method Explorer) и редактора методов (Method Editor) объединены в одно окно.
- Упрощены все панели инструментов.
- Пользовательский интерфейс автоматически настраивается в зависимости от загруженного файла или файлов.
- Для работы доступны только меню и окна, соответствующие типу загруженных файлов данных.
- Поиск в базе данных (Database Search) и поиск в библиотеке (Library Search) объединены и теперь выполняются как одно действие. Программа автоматически запускает нужное действие в зависимости от используемых данных, а также выбранных баз данных и библиотек.
- В разделе автоматизации метода (Method Automation) выбирается один из четырех рабочих процессов: **Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)**, **Sample Purity (Чистота пробы)**, **Compound Discovery (Обнаружение соединений)** и **Custom (Пользовательский)**. В программе Qualitative Navigator можно выполнить только пользовательский рабочий процесс (Custom). В программе Qualitative Analysis Workflows можно выполнить любой рабочий процесс.
- При выполнении рабочего процесса можно извлечь дополнительные хроматограммы.

- Запустить рабочий процесс можно в меню метода (Method).
- В графиках больше не отображается серая линия, которая раньше указывала на последнее выбранное расположение. Серая вертикальная линия указывает на текущее расположение в графике, но когда курсора нет в данном окне, линия исчезает.
- В Qualitative Analysis используются последние версии алгоритмов, применяемые также в программе MassHunter Quantitative Analysis.
- Методы и результаты программного обеспечения Qualitative Analysis совместимы с предыдущими версиями.
- Функции BioConfirm удалены из программ Qualitative Analysis.

Перечисленные ниже возможности доступны в программе Qualitative Analysis Navigator.

- Инструмент выбора пика (Peak Select) является заданным по умолчанию инструментом в окне результатов хроматограммы (Chromatogram Results).
- Инструмент выбора пика (Peak Select) работает так же, как и инструмент выбора диапазона (Range Select), и вы можете выбирать произвольные диапазоны с помощью любого из инструментов, если хроматограмма не интегрирована. Если же хроматограмма интегрирована и выбранный вами диапазон накладывается на один или несколько пиков, то инструмент выбора пика (Peak Select) выбирает диапазон времени удерживания этих пиков.
- Окно предварительного просмотра спектра (Spectrum Preview) закрывается автоматически.
- Программу BioConfirm (если она установлена) можно запустить из программы Qualitative Analysis Navigator.

Перечисленные ниже возможности доступны в программе Qualitative Analysis Workflows.

- Все функции, связанные с поиском соединений, собраны в программе Qualitative Analysis Workflows.

- Можно выбрать функцию Auto-Select Compound Mining (Автовыбор анализа соединений) для рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) и Compound Discovery (Обнаружение соединений).
- Рабочий процесс Compound Discovery (Обнаружение соединений) автоматически запускает рабочий процесс Compound Identification (Определение соединений).
- Алгоритм поиска по фрагментам (Find by Fragments) выполняется в отношении данных ГХ/ТОФ или ГХ/Q-ТОФ.
- Для рабочих процессов можно выбирать разные шаблоны отчета.
- Столбец Score (Frag Ratio) (Степень (отношение фрагг.)) доступен в окне списка соединений (Compound List).
- Концентрация CI поддерживается для рабочего процесса All Ions (Все ионы) ГХ/Q-ТОФ.
- Можно создать файл CEF при подтверждении фрагмента (Fragment Confirmation) с использованием данных EI ГХ/Q-ТОФ.
- Можно применять наложение хроматограмм для выбранных соединений в разделе Sample Chromatogram (Хроматограмма пробы).
- Кнопка Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы) доступна в окне результатов хроматограммы пробы (Sample Chromatogram Results).
- Можно извлечь ионную хроматограмму (EIC), дважды щелкнув в спектре МС-МС или МС соединения.
- Если дважды щелкнуть в области хроматограммы пробы (Sample Chromatogram), соединение будет извлечено и добавлено в окно списка соединений (Compound List), при этом в качестве алгоритма анализа (Mining Algorithm) используется извлечение спектра (Spectrum Extraction).

- В окне результатов хроматограммы соединения (Compound Chromatogram Results) выполняется относительное масштабирование.
- В окне таблицы проб (Sample Table) отображаются подробные сведения о пробе и сводные результаты (Result Summary). Можно изменять параметры подготовки проб.
- На панели заголовка в окне списка соединений (Compound List) отображается сводная информация.
- В списке соединений (Compound List) столбцы сгруппированы по категориям.
- В списке соединений (Compound List) есть только один уровень.
- Алгоритм Find by Molecular Feature (Найти по молекулярной характеристике) позволяет выполнять поиск характеристик для данных ГХ/МСД и ГХ/Q-TOF.
- Параметр Q-Score учитывается при создании файла CEF с соединениями MFE.
- В программе Agilent Walkup доступны новые столбцы Qualitative Analysis.
- В программе Agilent Data Acquisition для TOF/Q-TOF доступны новые столбцы Qualitative Analysis.

Перед выполнением упражнений...

- Установите программное обеспечение. Для получения инструкций см. руководство по установке.
- Скопируйте папку **Data** с установочного диска в несжатом формате на жесткий диск своего компьютера.

В этой папке находятся все файлы данных, необходимые для выполнения упражнений. Может понадобиться извлечь файлы данных из архива ZIP.

ПРИМЕЧАНИЕ

Не используйте образцы файлов данных, которые уже имеются на компьютере, если не уверены, что эти файлы являются копиями оригиналов, которые хранятся на диске, или если несколько человек пользуются этими файлами. Если образцы файлов данных на вашем компьютере отличаются от оригиналов на диске, результаты, полученные в ходе упражнений, будут отличаться от тех, которые указаны в руководстве.

Содержание

Упражнение 1 Знакомство с основами качественного анализа	13
Задание 1. Откройте программу Qualitative Analysis Navigator	14
Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы	17
Задание 3. Закрепление хроматограммы	19
Задание 4. Изменение компоновок окон	20
Задание 5. Извлечение хроматограмм	22
Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС	25
Задание 7. Расчет значений пригодности системы	31
Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы	35
Задание 9. Добавление примечаний	47
Задание 10. Добавление измерителя для массы	52
Упражнение 2 Поиск и определение	55
Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы	56
Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)	60
Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)	64
Задание 14. Найдите соединения по интегрированию	68
Задание 15. Поиск по фрагментам	71
Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке	82
Задание 17. Сохраните результаты	89
Упражнение 3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать	95
Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)	96
Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)	101
Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)	105

Содержание

Задание 21. Экспортируйте файл CEF	110
Задание 22. Печать отчета об анализе	114
Задание 23. Печать отчета по соединениям	119

Справка 125

Программа Qualitative Analysis Navigator	126
Основные функциональные области	126
Окна в программе Qualitative Analysis Navigator	131
Программа Qualitative Analysis Workflows	143
Основные функциональные области	143
Окна в программе Qualitative Analysis Workflows	147
Программы Qualitative Analysis Navigator и Workflows	165
Компоновка	165
Настройка шаблона отчета	167



Упражнение 1

Знакомство с основами качественного анализа

Задание 1. Откройте программу Qualitative Analysis Navigator	14
Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы	17
Задание 3. Закрепление хроматограммы	19
Задание 4. Изменение компоновки окон	20
Задание 5. Извлечение хроматограмм	22
Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС	25
Задание 7. Расчет значений пригодности системы	31
Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы	35
Задание 9. Добавление примечаний	47
Задание 10. Добавление измерителя для массы	52

В этом упражнении вы познакомитесь с некоторыми из множества полезных функций программы Qualitative Analysis Navigator для работы с данными ГХ/Q-TOF и ГХ/QQQ. Большинство приведенных здесь базовых заданий можно выполнять с помощью программы Qualitative Workflows, однако конкретные процедуры могут быть разными.

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 вы найдете советы и дополнительную информацию о каждом этапе упражнения.



1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 1. Откройте программу Qualitative Analysis Navigator

Задание 1. Откройте программу Qualitative Analysis Navigator

В этом задании вы откроете несколько файлов данных с помощью программы Qualitative Analysis Navigator, используя текущий метод.

Задание 1. Откройте программу качественного анализа с несколькими файлами данных

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Откройте программу качественного анализа.</p> <ul style="list-style-type: none">Откройте файлы данных Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d и MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке <code>\\MassHunter\Data</code> или в папке, куда вы их скопировали.	<p>a Дважды щелкните значок Agilent MassHunter Qualitative Analysis Navigator V.08.00 .</p> <p>Система отобразит диалоговое окно Open Data Files (Открытие файлов данных).</p> <p>b Перейдите к папке <code>\\MassHunter\Data\GCMS Pesticide</code> или к папке, где находятся файлы примеров.</p>	<ul style="list-style-type: none">Файл Pest - 200 - Scan.d содержит данные МС, а файлы Pest - STD 200 MRM.d и Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d содержат данные МС и данные МС/МС (все GX/QQQ). Файл MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d содержит данные GX/Q-TOF.Справку можно вызвать для большинства вкладок и окон, в т. ч. диалоговых, нажав клавишу F1, когда данное окно активно.Щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных), если файлы находятся в разных папках.

- Убедитесь, что кнопка **Use current method (Использовать текущий метод)** нажата.
- Убедитесь, что пункт **Load result data (Загрузить результаты)** не отмечен или затенен. Если пункт **Load result data (Загрузить результаты)** недоступен, это значит, что результаты не были сохранены в файле данных. Научитесь сохранять результаты вы сможете в «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

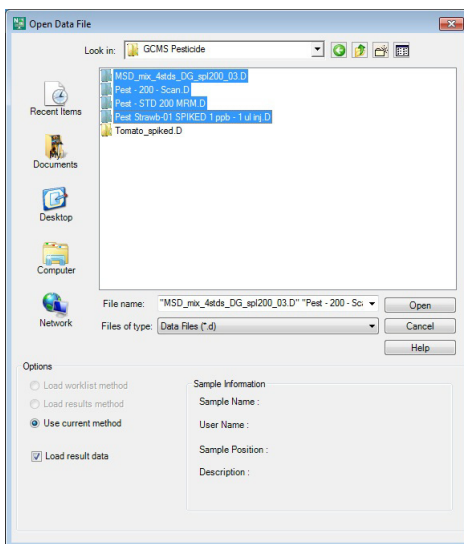



Рис. 1 Открытие файлов данных при открытии программного обеспечения

Задание 1. Откройте программу качественного анализа с несколькими файлами данных (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	<p>c Нажмите и удерживайте клавишу Shift, одновременно щелкните MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d, затем — Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d.</p> <p>d Выберите команду Open (Открыть). Все четыре файла данных отобразятся в окне навигатора по данным (Data Navigator), и от 1 до 4 хроматограмм отобразятся в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>e На панели инструментов в окне результатов для хроматограммы (Chromatogram Results) щелкните значок List Mode (Режим списка) ()</p>	<ul style="list-style-type: none"> Нажав клавишу Ctrl, можно выбрать файлы, которые не расположены подряд в списке. То, что отобразится в главном окне на этом этапе, зависит от метода, компоновки окон, настроек отображения и графиков, которые использовались до того, как вы открыли эти файлы. Если щелкнуть значок List Mode (Режим списка), его фон изменится на оранжевый.

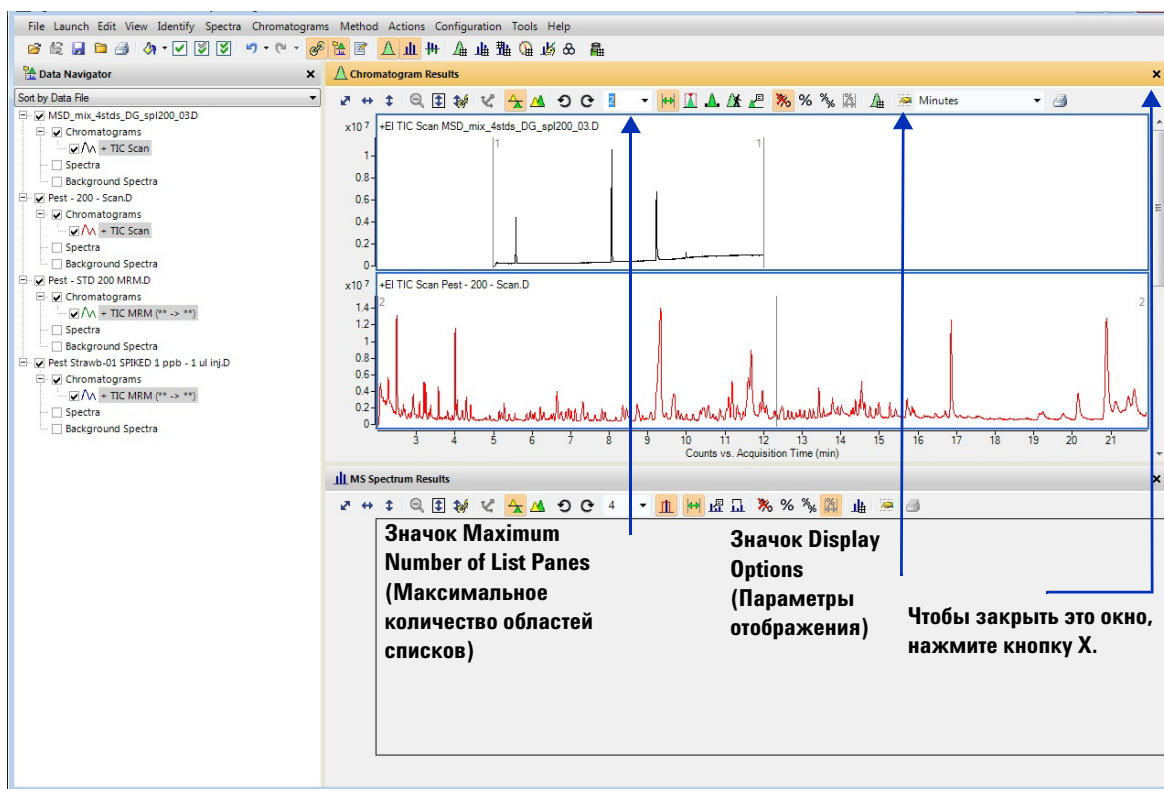


Рис. 2 Главное окно качественного анализа

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 1. Откройте программу Qualitative Analysis Navigator

Задание 1. Откройте программу качественного анализа с несколькими файлами данных (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Восстановите компоновку и метод по умолчанию в главном окне. <ul style="list-style-type: none">• Должны быть показаны все четыре хроматограммы.	<p>a При необходимости выберите пункты Configuration (Конфигурация) > Window Layouts (Компоновки окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните стрелку вниз рядом со значком Maximum Number of List Panes (Максимальное количество областей списка) на панели инструментов в окне результатов для хроматограммы (Chromatogram Results), затем выберите 4.</p> <p>c Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>d Выберите <i>default-GCMS.m</i>.</p> <p>e Выберите команду Open (Открыть).</p> <p>f Может появиться сообщение с вопросом о том, нужно ли сохранить изменения в текущем методе. Выберите Да или Нет.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Программа Qualitative Navigator имеет адаптивный пользовательский интерфейс, который автоматически настраивается в зависимости от типов файлов данных, которые вы выбираете.

Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы

В этом задании вы познакомитесь с функциями увеличения и уменьшения масштаба в программе Qualitative Analysis Navigator. Функции масштабирования можно также использовать в программе Qualitative Analysis Workflows.




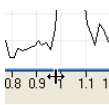
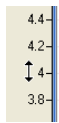
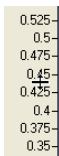
Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Попробуйте увеличить и уменьшить масштаб только одной из четырех хроматограмм (по осям X и Y).</p> <ul style="list-style-type: none"> • Скройте все остальные. • Дважды увеличьте масштаб последнего пика. • Увеличьте масштаб еще раз при автоматическом масштабировании оси Y. • Уменьшите масштаб до предыдущего состояния. • Максимально уменьшите масштаб до исходного состояния хроматограммы. 	<p>a В окне навигатора по данным (Data Navigator) снимите флажки рядом с теми хроматограммами, которые необходимо скрыть.</p> <p>b Убедитесь, что для следующего шага не выбран значок Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование по оси Y при изменении масштаба) .</p> <p>c Щелкните правую кнопку мыши и проведите по области последнего пика.</p> <p>d Повторите шаг c.</p> <p>e Щелкните значок Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y)  на панели инструментов.</p> <p>f Еще раз щелкните правую кнопку мыши и третий раз проведите по области последнего пика. В программах Qualitative Analysis Navigator и Qualitative Analysis Workflows автоматически изменяется масштаб по оси Y до самого большого значения в диапазоне.</p> <p>g Нажмите на значок Unzoom (Уменьшение масштаба)  для отмены последней операции масштабирования. Можно произвести отмену последних пятнадцати операций масштабирования.</p> <p>h Нажмите на значок Autoscale X-axis and Y-axis (Автоматическое масштабирование осей X и Y)  для максимального уменьшения масштаба.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Если строка не отмечена в окне навигатора по данным, то данная информация не отображается ни в каком другом окне программы качественного анализа. Необходимо просто поставить флажок рядом с данной информацией в окне навигатора по данным, и информация опять отобразится в других окнах. • Выбранный значок имеет оранжевый цвет фона. • В программе Qualitative Analysis Navigator можно также использовать эти функции масштабирования для спектров в других окнах графиков. • В программе Qualitative Analysis Workflows можно также использовать эти функции в окнах Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы), Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения), Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра MS соединения), Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения), Spectral Difference Results (Результаты по разнице спектров).

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы

Задание 2. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>2 Попробуйте увеличивать и уменьшать масштаб каждой оси по отдельности.</p> <ul style="list-style-type: none">Увеличьте масштаб только по оси X. Подсказка. Правой кнопкой щелкните по значениям оси X и переместите курсор слева направо.Частично уменьшите масштаб по оси X. Подсказка. Передвиньте курсор в противоположном направлении.Максимально уменьшите масштаб по оси X.Повторите предыдущие шаги для оси Y.	<p>a Для увеличения масштаба по оси X перемещайте курсор к значениям оси X до появления двойной горизонтальной стрелки.</p> <p>b Щелкните правой кнопкой мыши и перетащите новый курсор слева направо через значения оси X.</p> <p>c Для уменьшения масштаба по оси X щелкните правую кнопку мыши и перетащите справа налево по значениям оси X.</p> <p>d Нажмите на значок Autoscale X-axis (Автоматическое масштабирование по оси X)  для максимального уменьшения масштаба по оси X.</p> <p>a Для увеличения масштаба по оси Y перемещайте курсор к значениям оси Y до появления двойной вертикальной стрелки.</p> <p>b Щелкните правой кнопкой мыши и перетащите новый курсор снизу вверх через значения оси Y.</p> <p>c Для уменьшения масштаба по оси Y щелкните правую кнопку мыши и перетащите сверху вниз по значениям оси Y.</p> <p>d Нажмите на значок Autoscale Y-axis (Автоматическое масштабирование по оси Y)  для максимального уменьшения масштаба по оси X.</p>	<p>Двойная горизонтальная стрелка</p>  <p>Новый курсор появляется при щелчке правой кнопкой мыши по значениям оси X.</p>  <p>Двойная вертикальная стрелка</p>  <p>Новый курсор появляется при щелчке правой кнопкой мыши по значениям оси Y.</p> 

Задание 3. Закрепление хроматограммы

В этом задании вы закрепите хроматограмму. После закрепления хроматограмма будет постоянно оставаться на экране, в то время как вы будете просматривать и отображать другие хроматограммы.

Задание 3. Закрепление хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<ul style="list-style-type: none"> • Закрепите хроматограмму. <ul style="list-style-type: none"> ◦ Выведите на экран все хроматограммы. ◦ Убедитесь, что для списка просмотра хроматограмм установлено значение 1. ◦ В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) выберите вторую хроматограмму полного ионного тока (TIC). ◦ Закрепите эту хроматограмму полного ионного тока (TIC). ◦ Прокрутите список хроматограмм. ◦ Отмените закрепление. 	<ul style="list-style-type: none"> a В навигаторе по данным (Data Navigator) отметьте хроматограммы, которые вы скрыли в предыдущем задании. b Установите максимальное количество областей в окне результатов хроматограмм (Chromatogram Results), равное 1. c В окне результатов хроматограмм (Chromatogram Results) прокрутите экран, если нужно, и выберите вторую хроматограмму полного ионного тока (TIC). d Щелкните правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выберите команду Set Anchor (Закрепить). e Используйте полосу прокрутки в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), чтобы просматривать хроматограммы в списке. Вторая хроматограмма полного ионного тока (TIC) остается видимой как первая хроматограмма. f Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Anchor (Отменить закрепление). 	<ul style="list-style-type: none"> • Если хроматограмма закреплена, в окне навигатора по данным (Data Navigator) рядом с названием закрепленной хроматограммы появляется значок закрепления. • После того как была закреплена одна хроматограмма, в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) могут появиться две, даже если для списка отображения установлено значение 1. Это означает, что вы просматриваете еще одну хроматограмму помимо закрепленной. • Можно щелкнуть правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выбрать команду Clear Anchor (Отменить закрепление) в контекстном меню. • Закрепить хроматограмму или спектр невозможно в программе Qualitative Analysis Workflows.

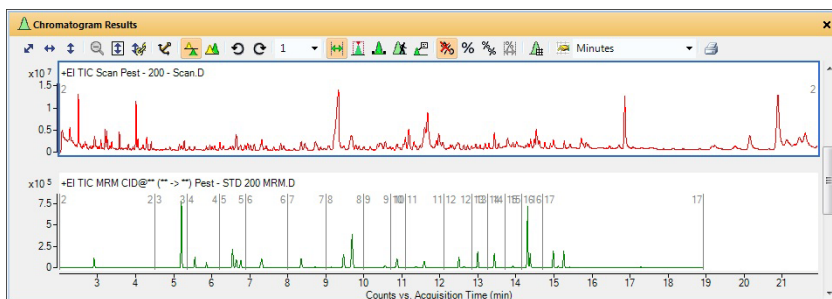


Рис. 3 Закрепленная хроматограмма (TIC) в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

Задание 4. Изменение компоновок окон

В этом задании вы научитесь перемещать окна в основном представлении и создавать различные компоновки окон. Сохранять компоновки можно и в Qualitative Analysis Navigator, и в Qualitative Analysis Workflows.

Задание 4. Изменение компоновки окон

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Измените компоновку окон:</p> <ul style="list-style-type: none"> Измените размер окна. Сохраните компоновку окон. Разблокируйте компоновку. Измените параметры окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), чтобы сделать его плавающим. Переместите окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Выведите на экран инструменты для изменения положения окон. 	<ul style="list-style-type: none"> Чтобы изменить размер окна, перетащите границу между окнами. Чтобы сохранить компоновку окон, выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Save Layout (Сохранить компоновку). Чтобы разблокировать компоновку, выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Lock Layout (Блокировка компоновки). Чтобы сделать окно плавающим, щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна и в контекстном меню выберите пункт Floating (Плавающее). Либо дважды щелкните на панели заголовка окна, чтобы сделать его плавающим. Чтобы переместить окно, щелкните в области заголовка окна и перетащите окно на необходимое место. Чтобы отобразить инструменты для изменения положения, перетащите окно и разместите его поверх другого окна. Когда одно окно перекроет другое, программа отобразит несколько инструментов компоновки (см. Рис. 4). 	<ul style="list-style-type: none"> Если компоновка разблокирована, система не отображает знак выделения возле пункта меню Lock Layout (Блокировка компоновки). Пользоваться инструментами для изменения положения окон можно только при разблокированной компоновке. Также, окно можно сделать плавающим, дважды щелкнув в области заголовка окна. Программное обеспечение содержит много различных готовых компоновок. Кроме того, компоновки можно загружать. Программное обеспечение содержит несколько различных рабочих процессов. С каждым рабочим процессом загружается отдельная компоновка. При переключении на другой рабочий процесс меняется и компоновка.

Задание 4. Изменение компоновки окон (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		

Рис. 4 Инструменты для изменения положения окон

<p>2 Измените положение окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <ul style="list-style-type: none"> • Переместите окно так, чтобы оно оказалось вверху, слева, справа и затем внизу по отношению к другим окнам. • Переместите два окна так, чтобы они оказались одно над другим и были доступны только с помощью вкладок внизу. • Восстановите компоновку по умолчанию. 	<ul style="list-style-type: none"> • Если при перетаскивании панели заголовка окна вы наведете курсор на один из более мелких значков, окно, которое вы перетаскиваете, окажется сверху, справа, снизу или слева от всех других окон. • Наведите курсор на более крупный значок. Кроме того, окно можно поместить сверху, справа, снизу или слева от другого окна, переместив курсор через края большего значка. • Чтобы открыть два окна вместе перетащите курсор в центр большего значка. Отобразится затененная версия двух окон, открытых вместе. Отпустите кнопку мыши. Два окна откроются вместе. • Чтобы вернуть плавающее окно на его последнее постоянное место, дважды щелкните его панель заголовка или выберите панель заголовка правой кнопкой мыши, затем щелкните пункт Floating (Плавающее). • Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию). 	<ul style="list-style-type: none"> • Чтобы положение изменилось, курсор должен находиться на одной из стрелок в поле. • Если выбрать команду Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию), будет восстановлена компоновка, заданная по умолчанию. Если вы загрузили другую компоновку, то вам вместо этого нужно загрузить данную компоновку. Чтобы загрузить компоновку, выберите пункты Configuration (Конфигурация) > Window Layouts (Компоновки окон) > Load Layout (Загрузить компоновку).
--	---	--

Задание 5. Извлечение хроматограмм

В этом задании вы извлечете и объедините хроматограммы из исходной хроматограммы полного ионного тока (TIC) с помощью программы Qualitative Analysis Navigator. В программе Qualitative Analysis Workflows можно извлечь дополнительные хроматограммы с использованием функции Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы) на панели инструментов в окне результатов хроматограммы пробы (Sample Chromatogram Results).

Задание 5. Извлечение хроматограмм

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Извлеките извлеченные ионные хроматограммы (EIC) из двух масс в файле данных Pest - 200 - Scan.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Значения m/z равны 129,0 и 414,2. • Не объединяйте пики из отдельных масс в одну хроматограмму. 	<p>a В окне навигатора по данным (Data Navigator) отмените выделение всех файлов данных, кроме Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>b Откройте диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм) с помощью параметра ниже или одного из параметров справа:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы). <p>c В списке List of opened data files (Список открытых файлов данных) выберите Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>d В окне списка Type (Тип) выберите EIC.</p> <p>e В поле m/z value(s) (значения m/z) введите 129.0, 414.2</p> <p>f При необходимости отмените выделение пункта Merge multiple masses into one chromatogram (Объединить несколько масс в одну хроматограмму), предназначенного для объединения ионных хроматограмм (EIC).</p> <p>g Если необходимо, снимите отметку пункта Integrate when extracted (Интегрирование после извлечения).</p> <p>h Нажмите кнопку OK.</p> <p>i На панели инструментов окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) установите для параметра Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) значение 4 или большее.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Также, хроматограммы можно извлекать одним из следующих способов. • Щелкните правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выберите пункт Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы). • В навигаторе по данным (Data Navigator) выделите пункт TIC Scan (TIC сканирования) для Pest - 200 - Scan.d; затем щелкните правой кнопкой мыши команду TIC Scan (TIC сканирования) и выберите пункт Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы). • Можно использовать уровень MC All (Все) или MS (МС). • Обратите внимание, что можно выбрать автоматическое интегрирование хроматограммы после извлечения. • Можно также извлечь хроматограмму из масс-спектра. • В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) показаны только три хроматограммы, потому что только три хроматограммы доступны.

Задание 5. Извлечение хроматограмм (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

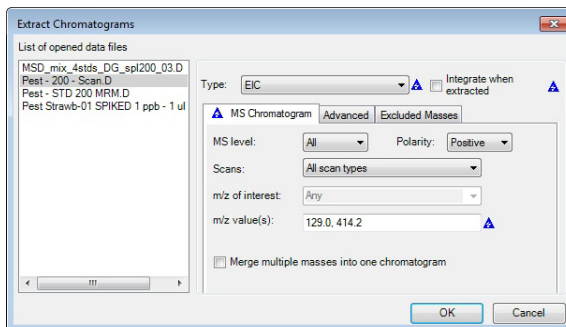


Рис. 5 Диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм)

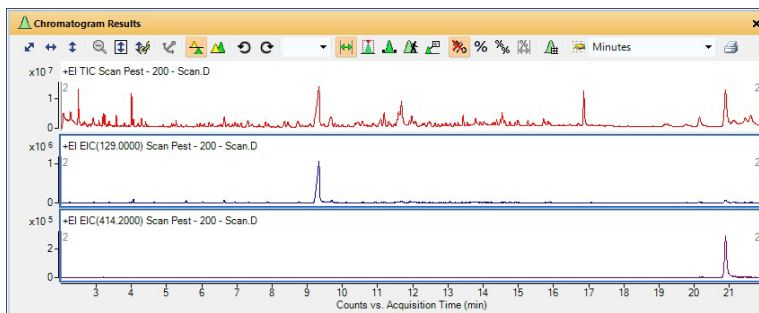


Рис. 6 Объединенные извлеченные ионные хроматограммы (EIC) в сравнении с исходной хроматограммой (TIC)

2 Извлеките извлеченные ионные хроматограммы (EIC) из двух масс в файле данных **Pest - 200 - Scan.d**.

- Значения m/z равны 129,0 и 414,2.
- Объедините пики из отдельных масс в одну хроматограмму.

- a Откройте диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм). Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)**.
- b В списке **List of opened data files** (Список открытых файлов данных) выберите **Pest - 200 - Scan.d**.
- c Установите флажок **Merge multiple masses into one chromatogram** (Объединить несколько масс в одну хроматограмму) для объединения ионных хроматограмм (EIC).
- d Нажмите кнопку **OK**.

- В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) автоматически появятся четыре хроматограммы.
- Название четвертой хроматограммы — "+EI EIC(129.0000, 414.2000) Scan Pest - 200 - Scan.D". Оба иона объединены в этой хроматограмме.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 5. Извлечение хроматограмм

Задание 5. Извлечение хроматограмм (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

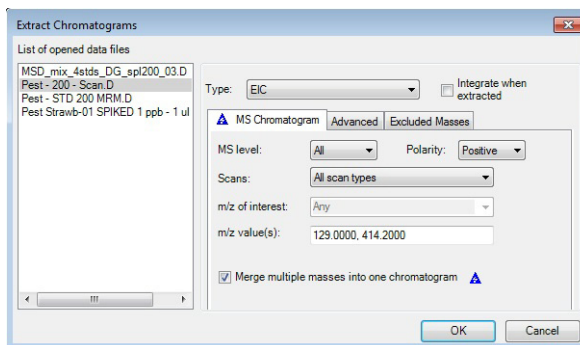


Рис. 7 Диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм) с установленным флажком **Merge multiple masses into one chromatogram** (Объединить несколько масс в одну хроматограмму).

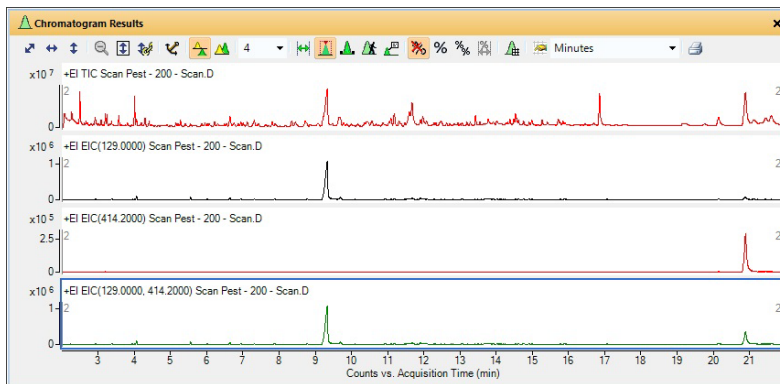


Рис. 8 Одна объединенная ионная хроматограмма (EIC) сравнивается с исходной хроматограммой полного ионного тока (TIC) и двумя ионными хроматограммами (EIC).

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС

В этом задании вы научитесь различным способам интегрирования хроматограммы, изменению параметров интегрирования для корректировки результатов и вычислению соотношения «сигнал-шум» для интегрированных пиков для данных МС-МС с использованием программы Qualitative Analysis Navigator.

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Интегрируйте сканированную хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных Pest - 200 - Scan.d с помощью любой из опций, указанных справа.</p> <p>a Отметьте файл данных Mark the Pest - 200 - Scan.D в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Выделите сканированную хроматограмму полного ионного тока (TIC) и используйте одну из приведенных ниже команд.</p> <ul style="list-style-type: none"> В контекстном меню выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). Щелкните правой кнопкой мыши в любом месте в окне хроматограммы и выберите пункт Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). В окне навигатора по данным (Data Navigator) выберите пункты Pest - 200 - Scan.D > Chromatograms (Хроматограммы) > TIC Scan (Сканированная TIC), затем правой кнопкой мыши щелкните пункт TIC Scan (Сканированная TIC) и выберите команду Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). 	<ul style="list-style-type: none"> Обратите внимание, что программа интегрирует практически все пики в хроматограмме. В окне редактора методов (Method Editor) следует выбрать необходимый интегратор для данных МС, данных МС/МС и данных ГХ. В данный момент используется хроматограмма МС, поэтому при ее интегрировании применяются значения, установленные в разделе Integrate (MS) (Интегрировать (МС)) редактора методов (Method Editor).
2	<p>Отобразите только две хроматограммы одновременно.</p> <ul style="list-style-type: none"> Выберите значение 2 в поле Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). 	

1 Знакомство с основами качественного анализа

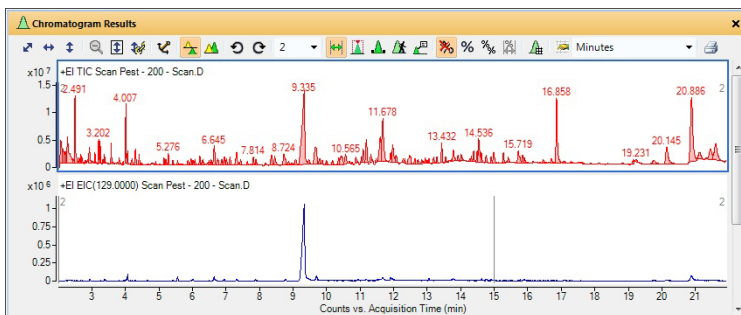
Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС) (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии



Интегрируется множество маленьких пиков.

Рис. 9 Интегрированная сканированная хроматограмма (ТІС) с множеством маленьких пиков

3 Измените порог, чтобы интегрировать меньше пиков.

- Измените порог, чтобы сохранить только три наибольших пика.

- Выберите пункты **View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов)**.
- В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS) (Интегрировать (МС))**.
- Перейдите на вкладку Integrator (Интегратор).
- Проверьте параметры.
- Перейдите на вкладку Peak Filters (Фильтры пиков).
- В разделе Maximum number of peaks (Максимальное количество пиков) отметьте пункт **Limit (by height) to the largest (Только наибольшие (по высоте))** и введите значение 3.

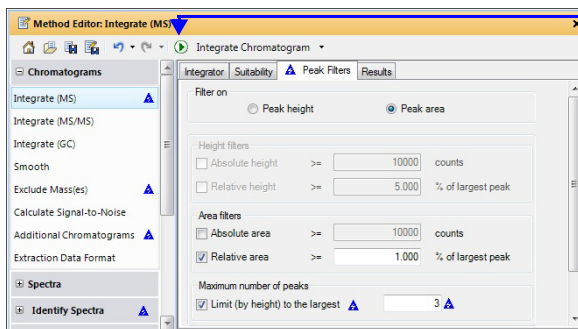
- При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают.

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС) (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции


Комментарии



На кнопке запуска написано **Integrate Chromatogram** (Интегрировать хроматограмму). Надпись изменяется в зависимости от того, какая вкладка показана в редакторе методов и какое действие выбрано.

Рис. 10 Вкладка Peak Filters (Фильтры пиков) с отмеченным параметром **Limit (by height) to the largest** (Только наибольшие (по высоте))

4 Повторное интегрирование хроматограммы

g Выберите  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor), чтобы выполнить интегрирование с новым параметром.

• Обратите внимание, что теперь интегрируются только три наиболее высоких пика.

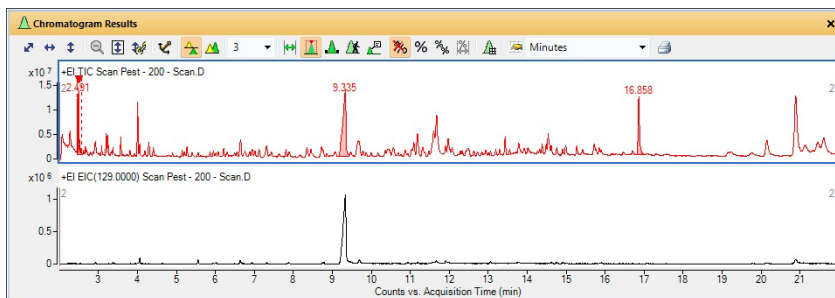



Рис. 11 Интегрированная сканированная хроматограмма (TIC) с ограниченным количеством пиков

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС) (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Интегрируйте хроматограмму TIC MRM для файла данных Pest - STD 200 MRM.D .	<p>a В окне навигатора по данным (Data Navigator) выберите файл данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>b В окне навигатора по данным (Data Navigator) выберите TIC MRM для файла данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>c Используйте одну из приведенных далее команд, чтобы интегрировать хроматограммы.</p> <ul style="list-style-type: none">В контекстном меню выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму).Щелкните правой кнопкой мыши в любом месте в окне хроматограммы и выберите пункт Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму).В окне навигатора по данным (Data Navigator) щелкните правой кнопкой мыши выделенную хроматограмму и выберите пункт Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). <p>d Щелкните значок Auto-scale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование по оси Y при изменении масштаба)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>e Установите увеличенный масштаб от 5,8 до 8,5 минут.</p> <p>f Установите для параметра Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) значение 2.</p>	<ul style="list-style-type: none">Обратите внимание, что программа интегрирует практически все пики в хроматограмме.В данный момент используются хроматограммы МС/МС, поэтому при интегрировании этой хроматограммы используются значения, установленные в разделе Integrate (MS/MS) (Интегрировать (МС/МС)) редактора методов (Method Editor).. Можно выбрать один интегратор для интегрирования хроматограмм МС и другой интегратор для интегрирования хроматограмм МС/МС.

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС) (продолжение)

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

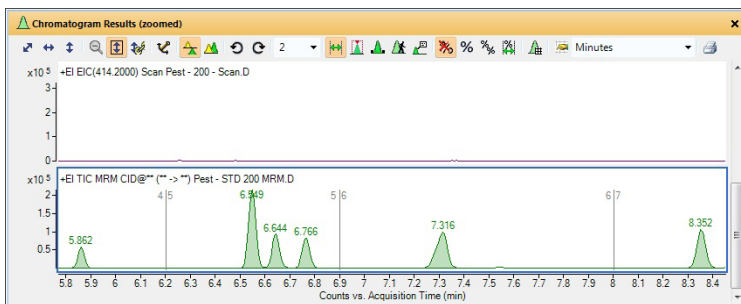
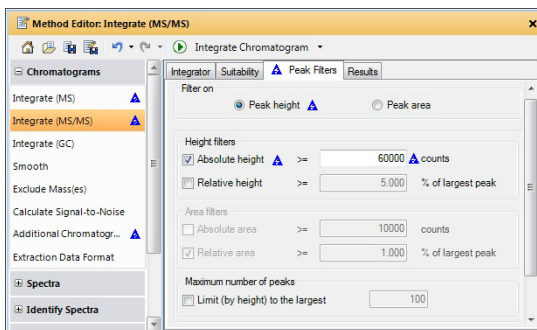


Рис. 12 Интегрированные хроматограммы MRM


- | | | |
|---|---|--|
| <p>6 Выберите интегратор MS/MS (GC) (МС-МС (ГХ)). Измените фильтр так, чтобы перенести только пики с абсолютной высотой не менее 60000.</p> | <p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (МС-МС)).</p> <p>b Перейдите на вкладку Peak Filters (Фильтры пиков).</p> <p>c В разделе Filter on (Параметр фильтра) выберите пункт Peak height (Высота пика).</p> <p>d В разделе фильтров высоты (Height filters) выделите пункт Absolute height (Абсолютная высота).</p> <p>e Введите значение 60000 для параметра Absolute height (Абсолютная высота).</p> | <p>• При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают.</p> |
|---|---|--|

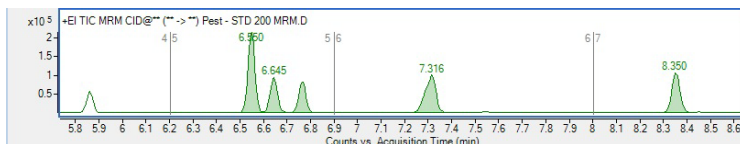
Рис. 13 Вкладка Peak Filters (Фильтры пиков) с отмеченным пунктом **Absolute height (Абсолютная высота)**

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС




Задание 6. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС) (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Повторное интегрирование хроматограммы	f Щелкните кнопку  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor).	• Обратите внимание, что теперь интегрируются только наибольшие пики.



Меньший пик с временем 5,8 минут уже не включен в результаты интегрирования, потому что абсолютная высота этого пика ниже 60000 единиц.


Рис. 14 Интегрированная хроматограмма полного ионного тока (TIC) с наиболее высоким значением порога

8 Восстановите параметры, сохраненные для текущего метода, и закройте редактор методов (Method Editor).	<p>a Выберите раздел Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (МС-МС)) в редакторе методов (Method Editor).</p> <p>b Щелкните значок  в редакторе методов (Method Editor).</p> <p>c Выберите раздел Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (МС)).</p> <p>d Щелкните значок  в редакторе методов (Method Editor).</p> <p>e Закройте окно редактора методов (Method Editor).</p>	• Чтобы отменить внесенные изменения и восстановить значения загруженного метода, щелкните значок Restore to last saved values from file (Восстановить последние сохраненные значения из файла)  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor).
9 Удалите все хроматограммы, кроме исходной. Удалите результаты интегрирования из исходной хроматограммы.	<p>a В разделе Chromatograms (Хроматограммы) окна навигатора по данным (Data Navigator) выделите все хроматограммы, кроме исходной.</p> <p>b Щелкните правой кнопкой мыши выделенные хроматограммы и выберите команду Delete (Удалить).</p> <p>c Выберите все хроматограммы полного ионного тока (TIC).</p> <p>d Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты).</p>	• Если использовать команду Clear Results (Очистить результаты), удаляются не хроматограммы, а связанные с ними результаты. В этом случае значения интегрирования очищаются. <p>• Нажмите клавишу Ctrl, чтобы выделить более одной хроматограммы в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p>

Задание 7. Расчет значений пригодности системы

В этом задании вы научитесь различным способам интерактивного интегрирования хроматограммы, изменению параметров интегрирования для корректировки результатов и просмотру соотношения «сигнал-шум» для каждого пика. Вы также научитесь выполнять расчеты значений пригодности системы.

Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы (МС)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Интегрируйте MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d и хроматограмму Pest - 200 - Scan.d, используя одну из опций, перечисленных справа.</p>	<p>a Установите отметку рядом с файлом данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Установите отметку рядом с файлом данных Pest - 200 - Scan.d в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>c Выделите обе хроматограммы (TIC).</p> <p>d Уменьшите масштаб в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Щелкните значок  в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>e Интегрируйте хроматограммы TIC Scan (Сканированная TIC) для этих двух файлов, используя любой из перечисленных далее вариантов.</p> <ul style="list-style-type: none"> • В главном меню выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). • Выделите хроматограммы. Затем щелкните ее правой кнопкой мыши и выберите пункт Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). • В окне навигатора по данным (Data Navigator) выделите пункт TIC Scan (Сканированная TIC) для обоих файлов данных. Затем щелкните правой кнопкой мыши любую из хроматограмм и выберите команду Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму). 	<ul style="list-style-type: none"> • Интегратор можно изменить, выбрав пункты Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (МС)) > вкладка Integrator (Интегратор). • Обратите внимание, что при интегрировании с параметрами по умолчанию определяются очень маленькие пики.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 7. Расчет значений пригодности системы

Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы (МС) (продолжение)

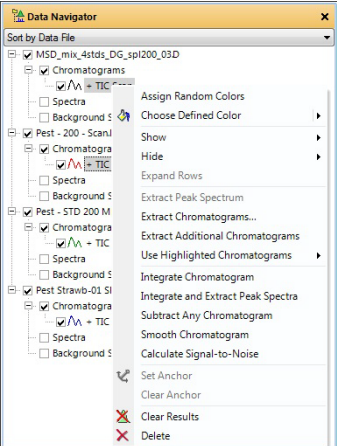
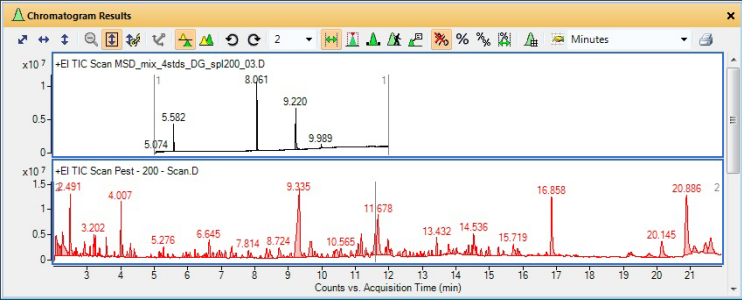
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		

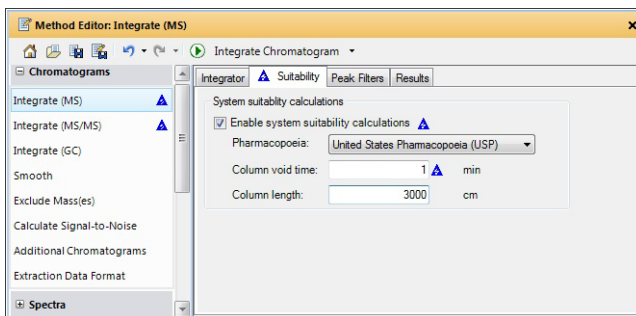
Рис. 15 Одно из контекстных меню в навигаторе по данным (Data Navigator) и интегрированные хроматограммы

2 Включите вычисления значений пригодности системы для хроматограмм МС.

- В редакторе методов (Method Editor) выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (МС) (Интегрировать (МС))**, после чего появится вкладка Integrator (Интегратор).
 - Выберите вкладку **Suitability (Пригодность)**.
 - Отметьте пункт **Enable system suitability calculations** (Включить расчеты пригодности системы).
 - Выберите пункт **United States Pharmacopoeia (USP)** (Фармакопея США).
 - В поле **Column void time** (Мертвое время колонки) введите значение 1.
 - В поле **Column length** (Длина колонки) введите значение 3000.
- При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают.
 - Алгоритмы, которые используются для установки нескольких колонок в списке пиков интегрирования (Integration Peak List), зависят от выбранной фармакопеи. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).


Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы (МС) (продолжение)

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



Фактическое время освобождения колонки и длина колонки для этих файлов данных отличаются от представленных значений. Эти значения используются только для данного примера.

Рис. 16 Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS) (Интегрировать (МС)), вкладка Suitability (Пригодность)

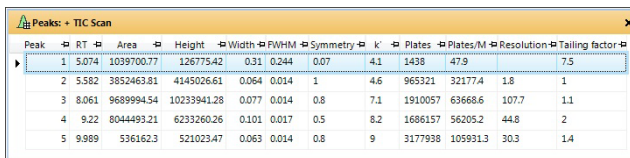
<p>3 Повторное интегрирование хроматограммы.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Щелкните значок Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor), чтобы выполнить интегрирование с новым параметром. 	
<p>4 Посмотрите расчеты пригодности системы.</p> <ul style="list-style-type: none"> Откройте окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List). Проверьте значения параметров пригодности системы. 	<ol style="list-style-type: none"> Выберите пункты View (Просмотреть) > Integration Peak List (Список пиков интегрирования). Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна Peaks (Пики) и выберите пункт Floating (Плавающее). Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка любого столбца, который не нужен, и выберите команду Remove Column (Удалить столбец). Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка любого столбца и выберите команду Add/Remove Columns (Добавить/удалить столбцы), чтобы изменить видимые столбцы. 	<ul style="list-style-type: none"> Расчеты пригодности системы включены в таблицу списка пиков интегрирования (Integration Peak List). Эти значения включают k', Tailing factor (Коэффициент размытия), Plates (Тарелки), Plates/M (Тарелки/м) и Symmetry (Симметрия). Можно также включить расчеты пригодности системы для хроматограммы МС, МС/МС и ГХ.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 7. Расчет значений пригодности системы


Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы (МС) (продолжение)

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



Peak	RT	Area	Height	Width	FWHM	Symmetry	K	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.074	1039700.77	126775.42	0.31	0.244	0.07	4.1	1438	47.9		7.5
2	5.582	3852463.81	4145026.61	0.064	0.014	1	4.6	965321	32177.4	1.8	1
3	8.061	9689994.54	10233941.28	0.077	0.014	0.8	7.1	1910057	63668.6	107.7	1.1
4	9.22	8044493.21	6233260.26	0.101	0.017	0.5	8.2	1686157	56205.2	44.8	2
5	9.989	536162.3	521023.47	0.063	0.014	0.8	9	3177938	105931.3	30.3	1.4

Рис. 17 Таблица интегрированных пиков со значениями пригодности системы

- 5 Восстановите значения для метода по умолчанию и закройте окно редактора методов (Method Editor) и окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List).
- a Чтобы отменить внесенные изменения и восстановить значения из метода по умолчанию, щелкните значок **Restore to last saved values from file** (Восстановить последние сохраненные значения из файла)  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor).
 - b Закройте окно редактора методов (**Method Editor**).
 - c Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна списка пиков интегрирования (Integration Peak List) и выберите пункт **Floating (Плавающее)**.
 - d Выберите пункты **View (Просмотреть) > Integration Peak List (Список пиков интегрирования)**.
- Если еще раз выбрать команду **Floating (Плавающее)** в контекстном меню, окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List) вернется на свое исходное место.

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

В этом задании вы извлечете спектр точно из указанного вами места в хроматограмме. Программа Qualitative Analysis Navigator извлекает спектр из определенной точки данных или извлекает средний спектр из среднего значения множества точек данных или диапазонов.

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Просмотрите хроматограмму и найдите исходный ион и дочерний ион для нескольких последних пиков в Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Приблизьте область между 13 и 16 минутами. • Используйте значок Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы). • Просмотрите спектры, начиная примерно с 13 минуты, перемещая стрелку вправо. 	<p>a Отметьте строку Pest - STD 200 - MRM.D в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Закройте окно редактора методов (Method Editor).</p> <p>c Выберите хроматограмму TIC MRM в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>d Щелкните значок Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>e Выберите значение 1 для параметра Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка).</p> <p>f Чтобы приблизить несколько пиков, щелкните правой кнопкой мыши над пиком на 13 минуте и протащите до 16 минуты, затем отпустите.</p> <p>g Щелкните значок Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>h Разместите курсор просмотра хроматограммы (Walk Chromatogram) над осью X примерно на 13 минуте и щелкните левой кнопкой мыши.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Окно просмотра спектров (Spectrum Preview) открывается только при выборе значка просмотра хроматограммы (Walk Chromatogram) . • Инструмент Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы) особенно полезен при работе с данными МС/МС для определения исходного и дочернего ионов.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	<p>i Чтобы перемещаться от спектра к спектру, щелкните хроматограмму или используйте клавиши со стрелками вправо и влево на клавиатуре. Вы также можете нажать и удерживать одну из этих клавиш со стрелками, чтобы быстро проверить диапазон времени удерживания.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Спектр для каждой точки, которую вы щелкаете в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), автоматически отображается в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) (открывается автоматически).• Иногда в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) отображаются несколько спектров. Например, в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) показаны два спектра для каждой точки, которую вы щелкнули возле пика на уровне 13,431 минуты.

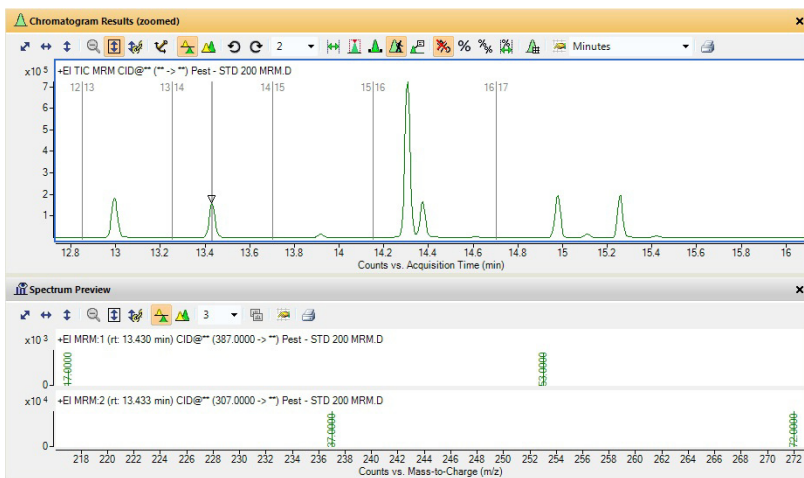






Рис. 18 Просмотр хроматограммы и двух спектров MRM для пика на уровне 13, 43 минуты

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>2 Извлеките спектры из указанных точек данных для пика на уровне 5,2 минуты и пика на уровне 14,3 минуты файла данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Извлеките спектр из пика на или около уровня 5,2 мин. и затем из одной из точек минимума, используя любую из вариантов, описанных в разделе комментариев (Comments). • Извлеките спектр из пика на или около уровня 14,3 минуты. (еще не точка минимума) 	<p>a Щелкните значок Range Select (Выбор диапазона)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>b Щелкните значок Zoom Out (Уменьшить масштаб)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>c Чтобы увеличить масштаб пика на уровне 5,2 минуты, щелкните правой кнопкой мыши над пиком на уровне 4,0 мин. и протащите до 6,0 мин., затем отпустите.</p> <p>d Из области пика на уровне 5,2 мин. извлеките спектр любым из способов, описанных в колонке комментариев (Comments).</p> <p>e На точке минимума возле уровня 5,1 мин. извлеките спектр.</p> <p>f Щелкните значок Zoom Out (Уменьшить масштаб)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>g Увеличьте масштаб области от 14 до 15 мин.</p> <p>h На пике возле уровня 14,3 минуты извлеките спектр любым из способов, описанных в колонке комментариев (Comments). (Не извлекайте пока спектр из точки минимума.)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Когда вы приближаете или отдаляете изображение, убедитесь, что значок AutoScale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование по оси Y при изменении масштаба)  имеет оранжевый фон. • Извлечь спектр можно одним из следующих способов. <ul style="list-style-type: none"> • Дважды щелкните точку данных в хроматограмме. • Щелкните точку данных в хроматограмме, затем щелкните правой кнопкой мыши в любом месте хроматограммы. Выберите пункт Extract MS Spectrum (Извлечь спектр MS). Появится диалоговое окно Extract Spectrum (Извлечение спектра). Убедитесь, что выбран файл Pest - STD 200 MRM.d, и выберите команду Extract (Извлечь) в диалоговом окне Extract Spectrum (Извлечение спектра). • Обратите внимание, что при первом извлечении спектра сам спектр появляется в окне результатов спектра MS (MS Spectrum Results), а тип спектра и время удерживания появляются в разделе Спектра (Спектры). Все последующие извлеченные спектры также появятся в обоих местах. • При извлечении спектра MS из пика возле уровня 14,3 минуты извлекаются два спектра, потому что на этом пике происходят два перехода.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<ul style="list-style-type: none">Измените представление, чтобы отобразить минимум четыре спектра.	<ul style="list-style-type: none">Если необходимо, выберите значение 4 для параметра Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) на панели инструментов в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results).	<ul style="list-style-type: none">Обратите внимание, что при первом извлечении спектра сам спектр появляется в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results), а тип спектра и время удерживания появляются в разделе Spectra (Спектры). Все последующие извлеченные спектры также появятся в обоих местах.При извлечении спектра МС из пика возле уровня 14,3 минуты извлекаются два спектра, потому что на этом пике происходят два перехода.

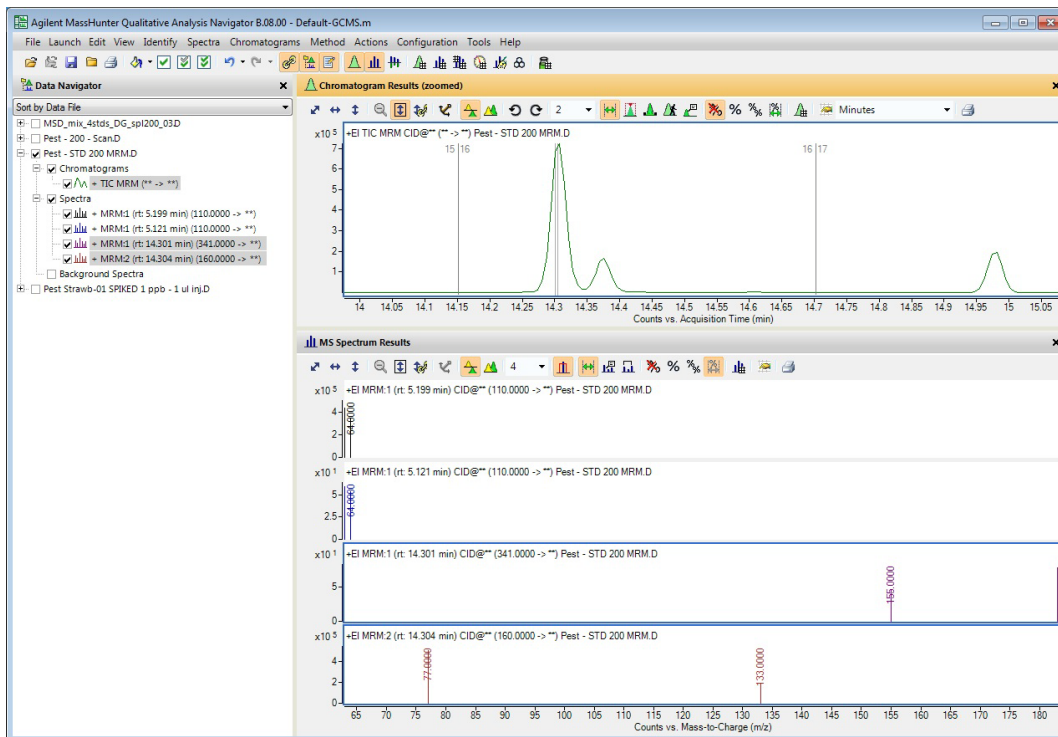




Рис. 19 Главное окно с двумя спектрами MRM из пика на уровне 5,2 мин. и двумя спектрами MRM из пика на уровне 14,3 мин.

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>3 Извлеките спектр МС для точки минимума на уровне 14,35 мин. из файла данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Включите просмотр спектров (Spectrum Preview). • Извлеките спектр из точки минимума на уровне времени удержания (RT) 14,3 минуты. • Скопируйте этот спектр в папку User Spectra (Спектры пользователя). • Измените представление, чтобы отобразить 6 спектров. • Выключите просмотр спектров (Spectrum Preview). 	<p>a Щелкните значок Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы)  в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> <p>b На точке минимума возле уровня 14,3 минуты извлеките спектр.</p> <p>c Выберите оба спектра в окне предварительного просмотра спектров (Spectrum Preview).</p> <p>d Щелкните спектры правой кнопкой мыши в окне предварительного просмотра спектров (Spectrum Preview) и выберите команду Copy to Spectra (Скопировать в спектры). Спектры будут скопированы в раздел спектров (Spectra) в навигаторе по данным (Data Navigator) и показаны в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results).</p> <p>e Щелкните значок Range Select (Выбор диапазона)  на панели инструментов в окне хроматограммы.</p> <p>f Щелкните стрелку вниз возле списка панелей спектров и выберите значение 6.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Когда выбран просмотр хроматограммы (Walk Chromatogram), система показывает каждый выбранный вручную спектр в окне предварительного просмотра спектров (Spectrum Preview), но не в разделе спектров (Spectra) навигатора по данным (Data Navigator). • При включенном просмотре хроматограммы (Walk Chromatogram) программа Qualitative Analysis Navigator перезаписывает предыдущий спектр, когда извлекается новый спектр. • Режим просмотра хроматограммы (Walk Chromatogram) полезен, когда необходимо быстро просмотреть спектры в хроматограмме и сохранить только некоторые из них.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

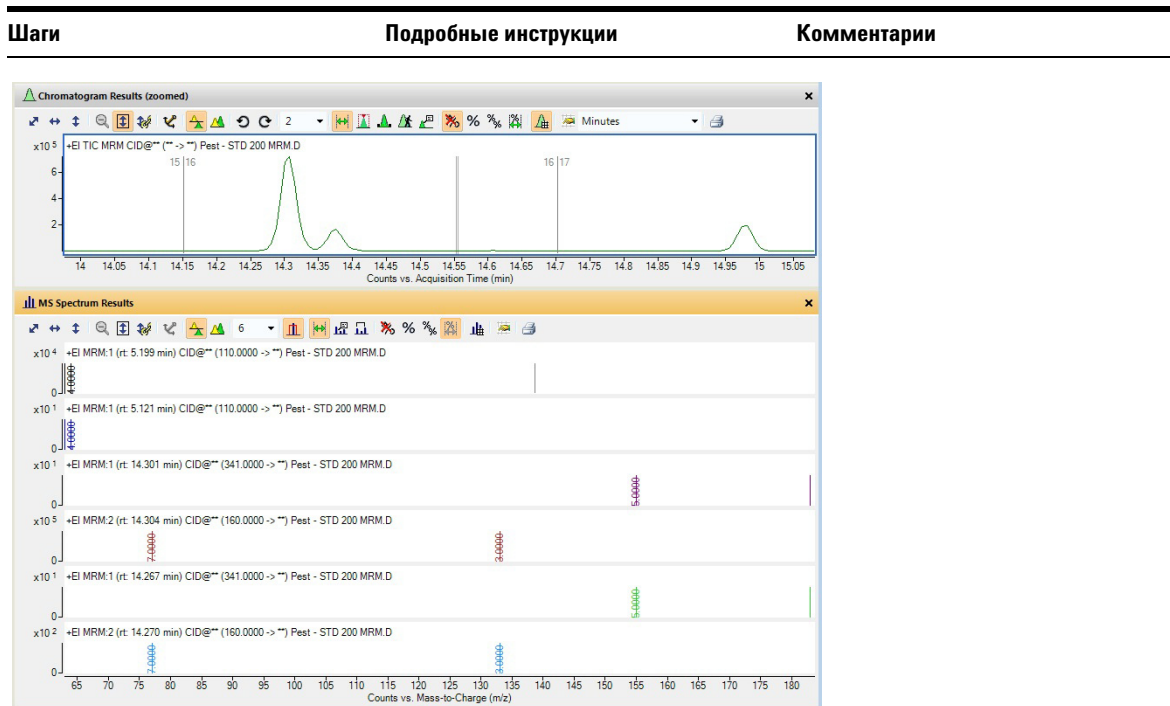


Рис. 20 Окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) и результатов спектра МС (MS Spectrum Results)

- 4** Извлеките спектр, в котором усредняются все точки в определенном диапазоне для пика на уровне 14,3 мин. в файле данных **Pest - STD 200 MRM.d**:
 - Уменьшите масштаб.
 - Используйте значок Range Select (Выбор диапазона) на панели инструментов в окне хроматограммы.
 - Установите диапазон, включающий весь пик.
 - Извлеките спектр с помощью любого из перечисленных способов.
 - a** Щелкните в левой части основания пика на уровне 14,3 мин. и протащите до основания пика справа.
 - b** Установите значение **2** в поле Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results).
 - c** Извлеките средний спектр с помощью одного из вариантов, описанных справа.
- Средний спектр можно извлечь, дважды щелкнув выбранный диапазон в хроматограмме.
- Или можно щелкнуть правой кнопкой мыши в любом месте хроматограммы и в контекстном меню выбрать команду **Extract MS Spectrum** (Извлечь спектр МС).
- Обратите внимание, что появятся два усредненных спектра MRM.

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

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

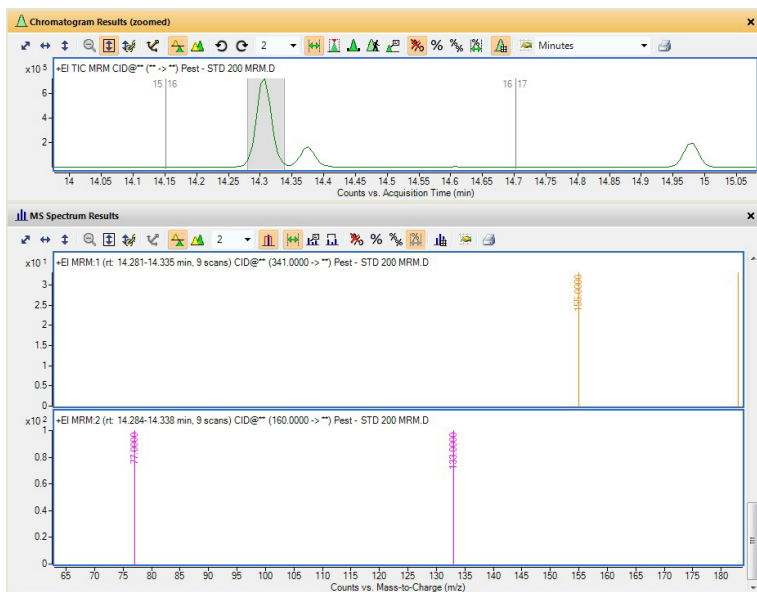



Рис. 21 Окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) и результатов спектра МС (MS Spectrum Results) с двумя усредненными спектрами

5 Извлеките спектры, в которых одновременно усредняются диапазоны пиков на уровне 5,2 мин. и 14,3 мин. для файла данных **Pest - STD 200 MRM.d**.

- Подсказка. Используйте значок Range Select (Выбор диапазона) и клавишу **Ctrl**, чтобы выбрать диапазон Пика 1, взятый из точки в центре.
- Извлеките спектр с помощью одного из способов, описанных справа.

- Щелкните значок **Zoom Out** (Уменьшить масштаб)  на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).
- Нажмите клавишу **Ctrl**.
- Щелкните в левой части пика на уровне 5,2 мин. и перетащите в правую часть пика, затем отпустите кнопку мыши.
- Отпустите клавишу **Ctrl**.
- Извлеките усредненные спектры с помощью следующего способа или любого их описанных справа.
 - Дважды щелкните внутри выбранного диапазона любого из пиков.

- Обратите внимание, что во втором пике уже есть диапазон, выбранный в шаге 4.
- Чтобы извлечь спектр, можно также щелкнуть правой кнопкой мыши в любом месте хроматограммы и выбрать команду **Extract MS Spectrum (Извлечь спектр МС)**. Появится диалоговое окно Extract Spectrum (Извлечение спектра). Щелкните пункт **Extract (Извлечь)**.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

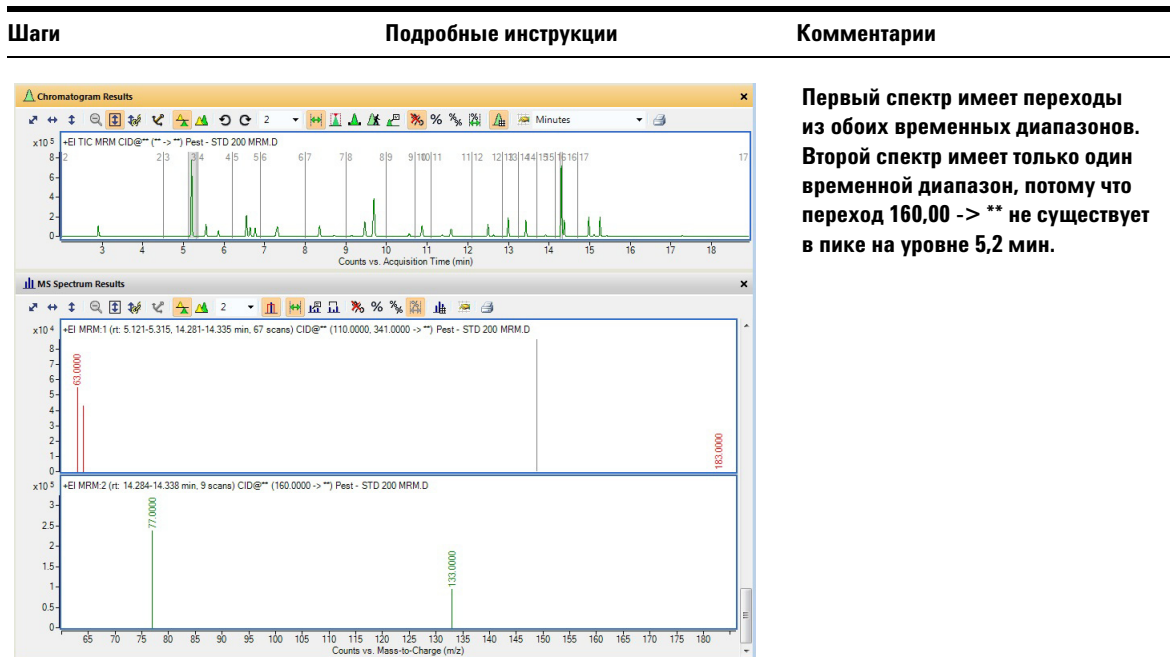



Рис. 22 Два усредненных спектра из двух разных диапазонов в хроматограмме

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>6 Вычитайте фоновый спектр каждый раз, когда извлекается спектр пика из Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Удалите все сканирования в разделе спектров пользователя (User Spectra) в навигаторе по данным (Data Navigator). • Извлеките фоновый спектр, который является средним между спектрами в начале и конце пика. • Извлеките спектр пика из интегрированных пиков. 	<p>a Щелкните строку Spectra (Спектры) в навигаторе по данным (Data Navigator). Щелкните правой кнопкой мыши строку Spectra (Спектры) и выберите команду Delete (Удалить).</p> <p>b Нажмите кнопку Yes (Да).</p> <p>c В редакторе методов (Method Editor) выберите пункты Spectra (Спектры) > Extract (MS/MS) (Извлечь (МС-МС)).</p> <p>d Выберите вкладку Peak Spectrum Extraction (MS/MS) (Извлечение спектра пиков (МС/МС)), если ее не видно.</p> <p>e В поле Peak spectrum background (Фон спектра пика) MS/MS (МСМС) выберите пункт Average of spectra at peak start and end (Среднее для спектров начала и конца пика).</p> <p>f На панели инструментов в окне результатов для хроматограммы (Chromatogram Results) щелкните значок Peak Select (Выбор пиков) .</p> <p>g Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (Интегрировать).</p> <p>h Выберите пик на уровне 5,2 мин.</p> <p>i Щелкните правой кнопкой мыши и в контекстном меню выберите команду Extract Peak Spectrum (Извлечь спектр пика).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Обратите внимание, что в конце этого процесса из всех извлеченных спектров пика будет автоматически исключен указанный фоновый спектр.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		<ul style="list-style-type: none">• Если в извлеченном спектре пика нет точек, возможно, следует изменить формат данных для извлечения (Extraction Data Format). В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Spectra (Спектры) > Extraction Data Format (Формат данных для извлечения). В разделе формата масс-спектральных данных выберите вариант, позволяющий извлекать данные в любом формате. В приведенных примерах следует выбрать вариант Profile (Линия), если доступно, а в остальных случаях — Centroid (Центрийд).

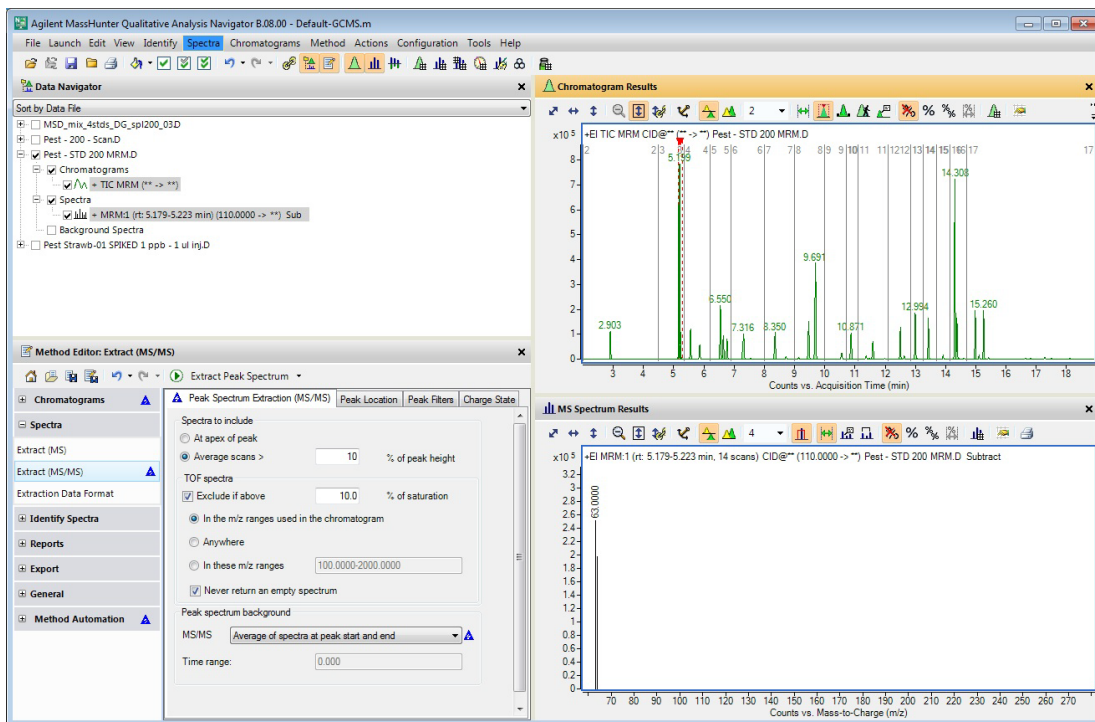


Рис. 23 Спектр пика с вычтенным фоновым спектром пика

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7	<p>Интегрируйте и извлеките спектры пиков из файла данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>a Выберите хроматограмму TIC MRM в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Спектры пиков, извлеченные вручную на предыдущем шаге, будут автоматически удалены, так как пункт Clear previous peak spectra (Очистить предыдущие спектры пиков) отмечен по умолчанию на вкладке результатов: Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (МС/МС)) > Results (Результаты).

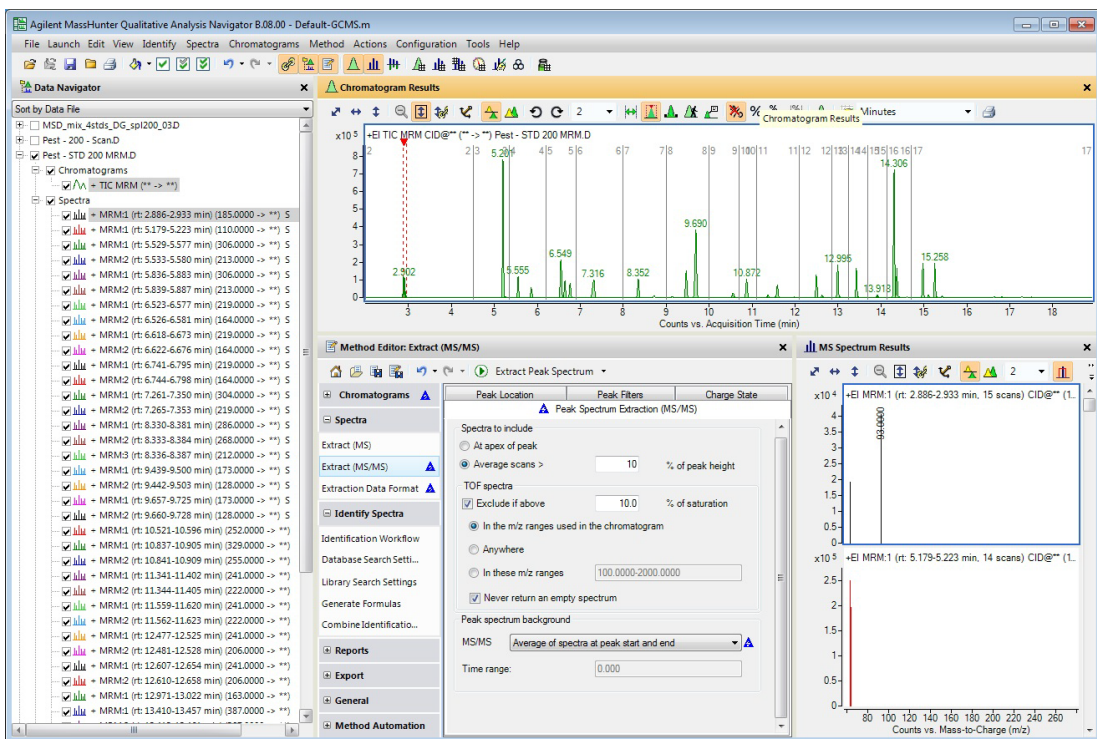


Рис. 24 Интегрирование и извлечение спектров пиков

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Задание 8. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Удалите результаты интегрирования и спектры пиков.	<p>a Выберите файл данных Pest - Std 200 MRM.d.</p> <p>b Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Include Peak Spectra (Включить спектры пиков).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Либо можно выбрать пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Only Chromatograms (Только хроматограммы), если не следует удалять спектры пиков.


Задание 9. Добавление примечаний

Можно добавить примечание в виде изображения или текста к следующим графическим окнам в окне Qualitative Analysis Navigator.

- Окно Chromatogram Results (Результаты для хроматограмм)
- Окно MS Spectrum Results (Результаты спектра МС)
- Окно UV Spectrum Results (Результаты УФ спектра)

Можно добавлять примечания в окнах программы Qualitative Analysis Workflows. При сохранении результатов для файла данных примечания также сохраняются.

Задание 9. Добавление примечания

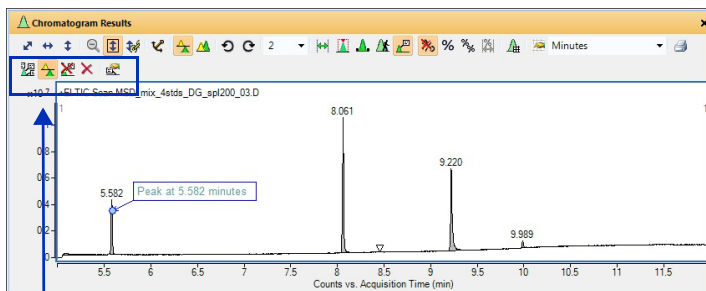
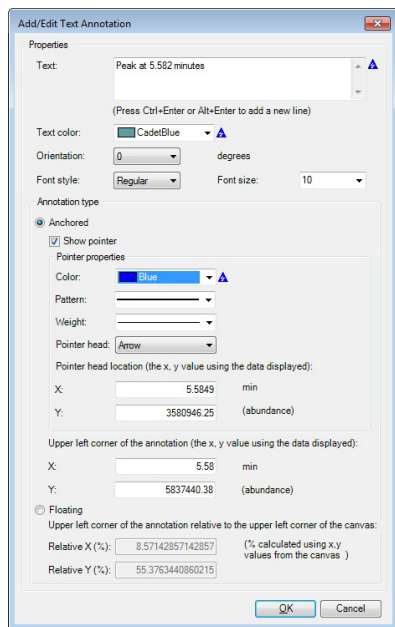
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Скройте другие хроматограммы.	<p>a Установите отметку рядом с пунктом MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Выберите команды Edit (Изменить) > Show (Показать) > Only Highlighted (Только выделенные).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Хроматограммы для других файлов данных будут автоматически скрыты.
2 Выберите место в хроматограмме, куда следует добавить текстовое примечание.	<p>a В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) на панели инструментов выберите элемент Annotation (Примечание) ().</p> <p>b Переместите курсор на место в области хроматограммы, где необходимо добавить примечание.</p> <p>c Щелкните правой кнопкой мыши и выберите команду Add Text Annotation (Добавить текстовое примечание).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Вместо курсора появится крестик. Используйте этот курсор, чтобы выбрать место для нового примечания. • Панель инструментов для примечаний (Annotate) доступна в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). • Также можно добавлять примечания к окну результатов спектра МС (MS Spectrum Results) и окну результатов УФ спектра (UV Spectrum Results).

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 9. Добавление примечаний

Задание 9. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3	<p>Добавьте информацию о текстовом примечании в диалоговом окне Add/Edit Text Annotation (Добавление/изменение текстового примечания).</p>	
	<p>a Введите Text (Текст) для примечания.</p> <p>b Выберите пункт Text color (Цвет текста).</p> <p>c Выберите пункт Orientation (Расположение).</p> <p>d Выберите пункты Font style (Стиль шрифта) и Font size (Размер шрифта).</p> <p>e Щелкните пункт Anchored (Закрепленное) или Floating (Плавающее). В случае варианта Anchored (Закрепленное) выберите параметры указателя для текстового примечания. В случае варианта Floating (Плавающее), можно менять относительное положение. Легче менять положение в графическом окне в интерактивном режиме.</p> <p>f Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• К хроматограмме или спектру можно добавлять несколько примечаний.• С помощью значков на панели инструментов для примечаний (Annotate) можно выбирать все примечания, а также удалять и изменять их.



Панель инструментов для примечаний (Annotate) доступна, только когда выбран инструмент Annotate (Примечания).

Примечание можно переместить в новое положение щелчком мыши и перетаскиванием примечания.

Рис. 25 Диалоговое окно Add/Edit Text Annotation (Добавление/изменение текстового примечания) и окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

Задание 9. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4 Выберите место в хроматограмме, куда следует добавить примечание-изображение.	<p>a Переместите курсор на место в области хроматограммы, где необходимо добавить примечание.</p> <p>b Щелкните правой кнопкой мыши и выберите команду Add Image Annotation (Добавить примечание-изображение).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Можно добавлять файлы с изображениями в формате JPG или MOL.

1 Знакомство с основами качественного анализа

Задание 9. Добавление примечаний

Задание 9. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Добавьте информацию о текстовом примечании в диалоговом окне Add/Edit Text Annotation (Добавление/изменение текстового примечания).	<p>a Выберите примечание-изображение.</p> <p>b Укажите значение 50 для ширины шкалы.</p> <p>c Отметьте пункт Lock aspect ratio (Зафиксировать соотношение размеров).</p> <p>d Выберите пункт Floating (Плавающее). Можно изменить относительное положение. Легче менять положение в графическом окне в интерактивном режиме.</p> <p>e Нажмите кнопку OK.</p> <p>f Переместите изображение в верхний правый угол хроматограммы.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Файл Agilent_Logo.tif содержится в папке \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.08.00\en-US\Letter. Его необходимо преобразовать в файл в формате JPG.• К хроматограмме или спектру можно добавлять несколько примечаний.

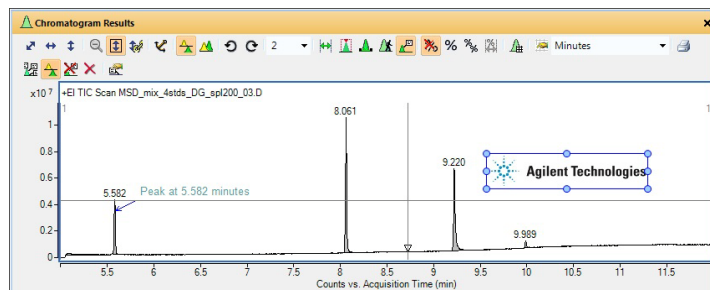
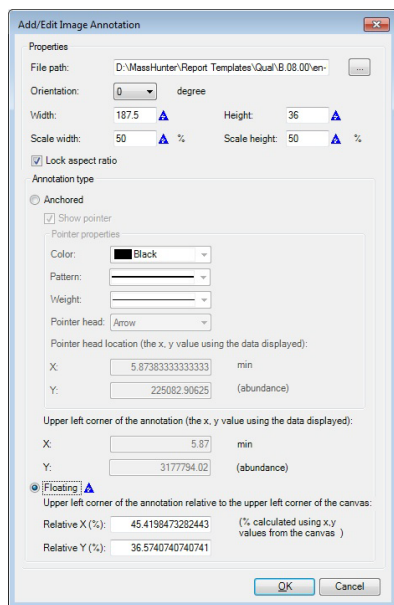
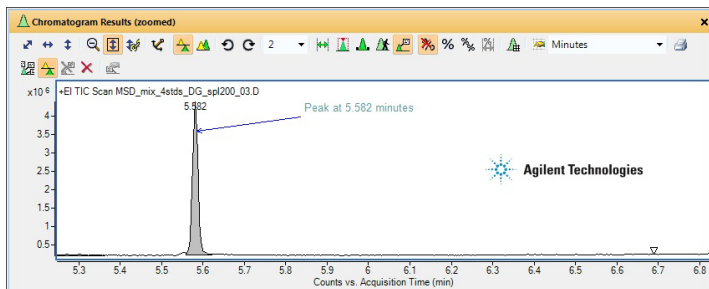


Рис. 26 Диалоговое окно Add/Edit Image Annotation (Добавление/изменение примечания-изображения) и окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)



Задание 9. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6	Увеличьте масштаб первого пика. • Увеличьте область возле первого пика на уровне 5,5 мин.	



Если примечание закреплено, оно остается в положении, в котором закреплено. При перемещении в область другого пика закрепленное примечание может не быть видимым. Если примечание плавающее, оно всегда отображается в одном и том же положении относительно верхнего левого угла окна.

Рис. 27 Закрепленное и плавающее примечания в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

- | | | |
|---|--|---|
| <p>7 Перейдите назад к инструменту выбора диапазона (Range Select) в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Сначала удалите примечание.</p> | <p>a Чтобы удалить все примечания, щелкните значок .</p> <p>b Щелкните значок  (Range Select (Выбор диапазона)) на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).</p> | <ul style="list-style-type: none"> • Если необходимо сохранить примечания с результатами файла данных, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89. • Можно переключаться между пятью различными инструментами на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help). Этими пятью инструментами являются: <ul style="list-style-type: none"> • Выбор диапазона (Range Select) • Выбор пиков (Peak Select) • Ручное интегрирование (Manual Integration) • Просмотр хроматограммы (Walk Chromatogram) • Мышь для примечаний (Annotation Mouse) |
|---|--|---|

1 Знакомство с основами качественного анализа



Задание 10. Добавление измерителя для массы

Задание 10. Добавление измерителя для массы

Измеритель показывает разницу между двумя точками в спектре. Можно добавить измеритель к окну результатов спектра МС (MS Spectrum Results).

При сохранении результатов для файла данных измерители также сохраняются.

Задание 10. Добавление измерителя для массы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Интегрируйте и извлеките спектры пиков из MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<p>a Установите отметку рядом с пунктом MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator).</p> <p>b Выберите команды Edit (Изменить) > Show (Показать) > Only Highlighted (Только выделенные).</p> <p>c Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Либо вы можете нажать кнопку Show only the highlighted (Показать только выделенные) () на главной панели инструментов.
2 Добавьте измеритель к спектру пика, созданному в предыдущем задании.	<p>a В окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results) на панели инструментов выберите элемент Delta Mass Caliper (Измеритель погрешности (дельта) для массы) ().</p> <p>b (дополнительно) На панели инструментов измерителя (Caliper) в качестве типа измерителя выберите Profile Point to Point (Линия от точки до точки).</p> <p>c Увеличьте масштаб от 79 к 99 <i>m/z</i>.</p> <p>d Переместите курсор на место в области спектра, где необходимо добавить измеритель.</p> <p>e Перетащите курсор к конечной точке измерителя в спектре. По мере перетягивания курсора будет меняться значение разности (дельта) для массы. Когда вы отпустите кнопку мыши, измеритель будет добавлен.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Курсор изменится на стрелку. Используйте этот курсор, чтобы обозначить начальную и конечную точку измерителя.• Невозможно выбрать тип измерителя, если спектр является центром массы, так как Profile Point to Point (Линия от точки до точки) никак не влияет на данные центра массы.• «Треугольный» курсор устанавливается на выбранной точке или на вершине пика, если используется параметр Profile Peak to Peak (Линия от пика до пика).

Задание 10. Добавление измерителя для массы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3	<p>Измените измеритель, чтобы использовался другой цвет.</p> <p>a Щелкните измеритель, созданный в предыдущем шаге.</p> <p>b Нажмите кнопку Caliper Properties (Свойства измерителя) () на панели инструментов в окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results).</p> <p>c (дополнительно) Введите значения для параметров Start X (Начало X) и Start Y (Начало Y).</p> <p>d Выберите пункт Text color (Цвет текста).</p> <p>e Выберите пункты Font style (Стиль шрифта) и Font size (Размер шрифта).</p> <p>f Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> К спектру можно добавлять несколько измерителей. С помощью значков на панели инструментов для измерителя (Caliper) можно выбирать все измерители, а также удалять и изменять их.

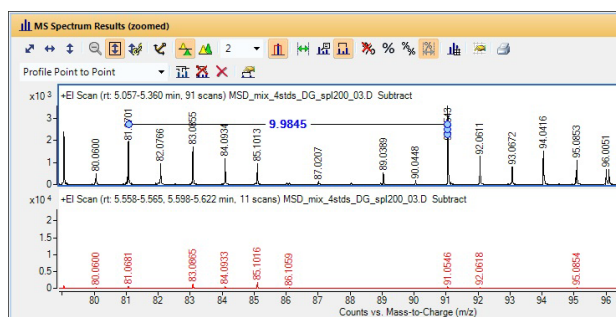
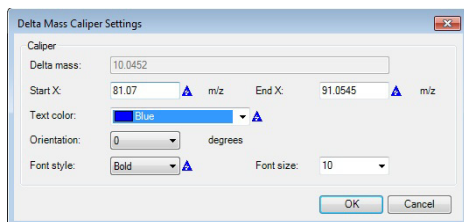
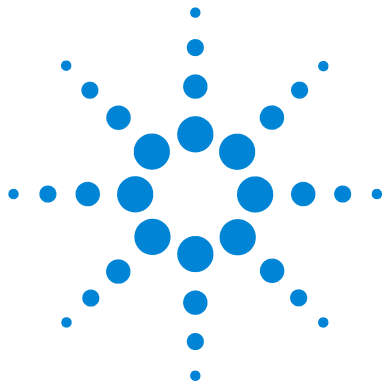


Рис. 28 Диалоговое окно Delta Mass Caliper Settings (Параметры измерителя разности (дельта) массы) и окно результатов спектра MC (MS Spectrum Results)

4	<p>Удалите результаты интегрирования и спектры.</p> <p>a Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Include Peak Spectra (Включить спектры пиков).</p> <p>b В окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results) щелкните по инструменту выбора диапазона Range Select.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Если необходимо сохранить измерители с результатами файла данных, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.
---	---	--

1 Знакомство с основами качественного анализа
Задание 10. Добавление измерителя для массы



Упражнение 2

Поиск и определение

- Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы 56
- Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database) 60
- Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM) 64
- Задание 14. Найдите соединения по интегрированию 68
- Задание 15. Поиск по фрагментам 71
- Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке 82
- Задание 17. Сохраните результаты 89

В этих заданиях вы будете находить и определять соединения в файлах данных ГХ/МС. Для анализа соединений используется программа Qualitative Analysis Workflows. В этой программе также можно определять соединения.

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 вы найдете советы и дополнительную информацию о каждом этапе упражнения.



2 Поиск и определение


Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

Этот алгоритм анализа соединения определяет соединения среди данных ГХ/МС и создает очищенный спектр МС для каждого соединения. Эта функция является простым способом «добыть» информацию из большого объема данных. Алгоритм нахождения по деконволюции хроматограммы (Find by Chromatogram Deconvolution) можно использовать только для данных о пробах ГХ/МС, полученных в режиме Scan, Product Ion scan или Neutral Loss scan.

Это задание демонстрирует поиск соединений по деконволюции хроматограммы с точными массовыми характеристиками. После изменения окна извлечения можно также находить соединения по деконволюции хроматограммы с массовой характеристикой пика.

Задание 11. Поиск соединений с использованием деконволюции хроматограммы (Chromatogram Deconvolution) (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows .</p> <p>В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none">Алгоритм нахождения соединений по деконволюции хроматограммы работает с файлами данных как ГХ/QQQ, так и ГХ/Q-TOF.Пользовательский интерфейс автоматически изменяется в зависимости от типа загруженных файлов данных.

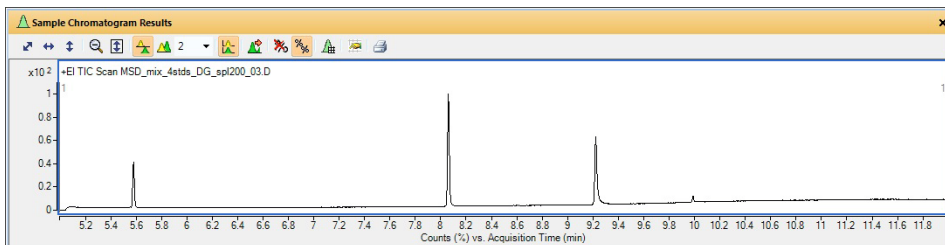


Рис. 29 Хроматограмма TIC из файла MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

Задание 11. Поиск соединений с использованием деконволюции хроматограммы (Chromatogram Deconvolution) (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
3	<p>Поиск соединений с использованием алгоритма деконволюции хроматограммы.</p> <ul style="list-style-type: none"> Выберите интегратор Agile. Введите пороговое значение SNR (соотношение сигнал — шум), равное 20. Введите значения 100 ppm для Left m/z delta (Дельта m/z слева) и Right m/z delta (Дельта m/z справа). <p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Compound Discovery (Обнаружение соединения) > Find by Chromatogram Deconvolution (Найти по деконволюции хроматограммы).</p> <p>b На вкладке настроек (Settings), под фильтром пиков (Peak) введите число 20 для порогового значения SNR.</p> <p>c Проверьте настройки для параметров m/z delta units (Дельта-значения m/z), Left m/z delta (Дельта m/z слева), Right m/z delta (Дельта m/z справа).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Если имеется массовая характеристика пиков, введите значение AMU (а. е. м.), равное 0, 3 для Left m/z delta (Дельта m/z слева) и 0, 7 для Right m/z delta (Дельта m/z справа)

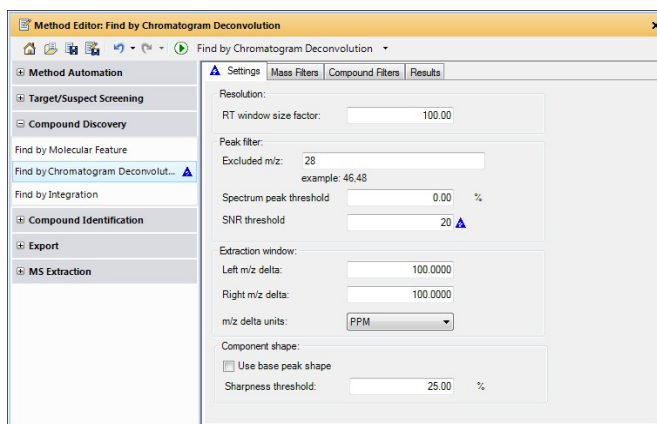


Рис. 30 Вкладка настроек (Settings) в разделе поиска по деконволюции хроматограммы (Find by Chromatogram Deconvolution)

2 Поиск и определение

Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

Задание 11. Поиск соединений с использованием деконволюции хроматограммы (Chromatogram Deconvolution) (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
<ul style="list-style-type: none">Используется для извлечения EIC, спектров МС и МС/МС.	<p>d Щелкните  для запуска алгоритма Find Compounds by Chromatogram Deconvolution (Поиск соединений по деконволюции хроматограммы) в файле данных.</p> <p>e При необходимости щелкните команду View (Просмотр) > Compound List (Список соединений).</p> <p>f Закройте окно редактора методов (Method Editor) и окно средства просмотра структуры (Structure Viewer).</p>	<ul style="list-style-type: none">Программа Qualitative Analysis Workflows найдет 5 соединений, удовлетворяющих заданным условиям.Вы также можете выбрать пункты Find (Найти) > Find by Chromatogram Deconvolution (Найти по деконволюции хроматограммы).Если не указать файл данных, выполнение алгоритма может занять много времени.

Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

Задание 11. Поиск соединений с использованием деконволюции хроматограммы (Chromatogram Deconvolution) (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4	Изучите соединения. См. Рис. 31.	<ul style="list-style-type: none"> • Отображение данных обоих спектров является удобным способом просмотра полной информации о соединении. • Обратите внимание, что отображаются данные обоих спектров — очищенного и неочищенного.

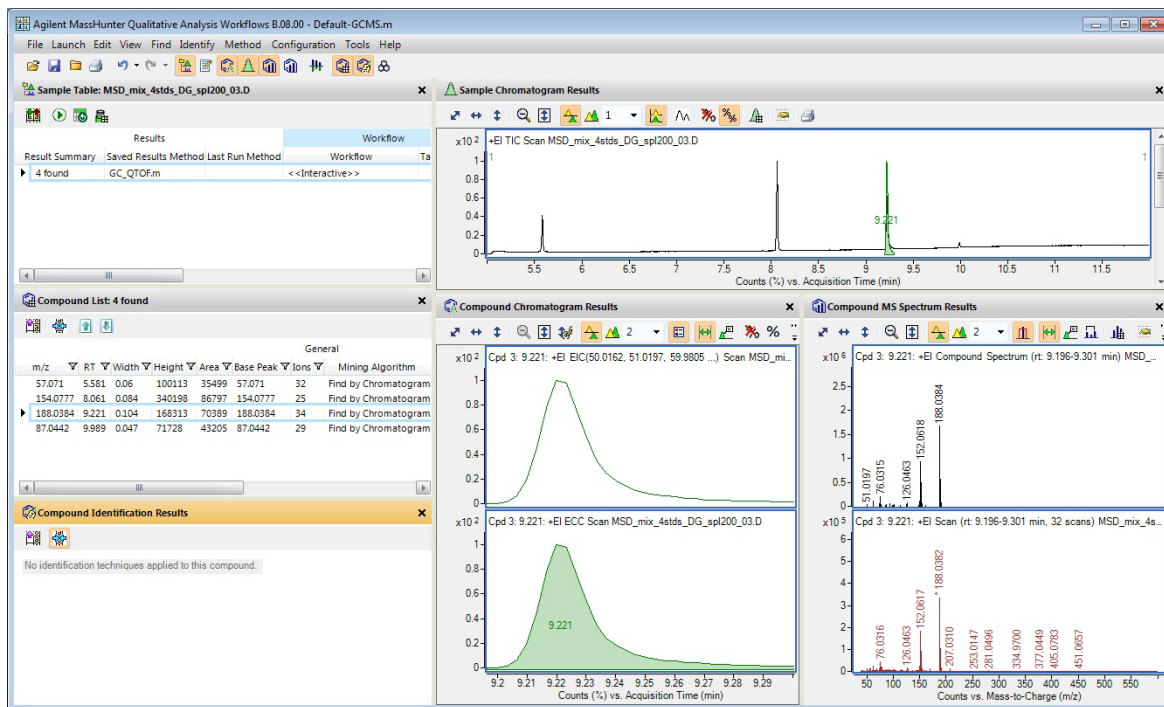


Рис. 31 Поиск соединений по результатам деконволюции хроматограммы

2 Поиск и определение

Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)

Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)

В процессе выполнения этих заданий будут осуществляться определение и генерирование формул для соединений, найденных в «[Задание 11. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы](#)» на стр. 56. Вы сможете приступить к выполнению этого задания, если приобрели библиотеку *NIST11.l* (или более поздней версии) или используете библиотеку *demo.l*. Если доступны две библиотеки, можно использовать обе.

Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)


Задание 12. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Выполните поиск в библиотеках/базах данных, чтобы найти все соединения в файле данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Выберите пункты View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов).</p> <p>b В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Compound Identification (Определение соединений) > Identification Workflow (Рабочий процесс определения).</p> <p>c Обратите внимание: установлен флажок Identify by - Library / Database search (Определение с помощью: поиск в библиотеках и базах данных).</p> <p>d (необязательно) Нажмите кнопку Add (Добавить). Выберите библиотеку NIST11.I и нажмите кнопку OK.</p> <p>e (необязательно) Выберите вариант Stop at first library match (Остановить поиск по библиотеке при первом совпадении) для поиска в нескольких библиотеках (Multi-Library search).</p> <p>f Выберите пункты Identify (Определить) > Identify All Compounds (Определить все соединения) в главном меню. Для запуска алгоритма можно также щелкнуть значок Identify All Compounds (Определить все соединения) — .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Demo.I и Nist11 должны быть установлены папке \MassHunter\Library. • Обратите внимание, что многие соединения определяются после поиска в библиотеке <i>NIST11.I</i>. • Если у вас нет библиотеки <i>NIST11.I</i>, выберите другую доступную библиотеку. • Если вы выбрали две библиотеки (или более), и у вас установлен параметр Stop at first library match (Остановить поиск по библиотеке при первом совпадении), алгоритм поиска в библиотеках начнет поиск с библиотеки, первой в списке. Поиск останавливается по нахождению соединения. Если соединение не определено, начинается поиск в следующей библиотеке. Поиск закончится, когда соединение будет найдено, или когда поиск дойдет до конца последней библиотеки. • Используйте программу редактирования библиотек (Library Editor) для изменения библиотек.L, которые используются алгоритмом поиска в библиотеке (Search Library). Эта программа устанавливается вместе с программой количественного анализа (Quantitative Analysis) Agilent MassHunter. Щелкните значок , чтобы запустить программу.

2 Поиск и определение

Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)

Задание 12. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2	<p>Измените отображаемые окна.</p> <ul style="list-style-type: none">a Выберите пункты View (Просмотр) > Difference Results (Результаты по разнице).b Щелкните View (Просмотр) > Structure Viewer (Средство просмотра структуры).c Щелкните вкладку окна Compound Identification Results (Результаты определения соединений), если необходимо отобразить это окно.d Выделите строку в списке соединений (Compound List), который был определен.e Нажмите кнопку «Скрыть пустые столбцы» (Hide Empty Columns, ) на панели инструментов окна списка соединений (Compound List) и на панели инструментов окна результатов определения соединений (Compound Identification Results).f Щелкните каждое соединение, чтобы просмотреть результаты.	<ul style="list-style-type: none">• Если соединение определено, в столбце формулы (Formula) указано значение.

Задание 12. Определение соединений с использованием алгоритма поиска в библиотеках и базах данных (Search Library/Database)

Задание 12. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии

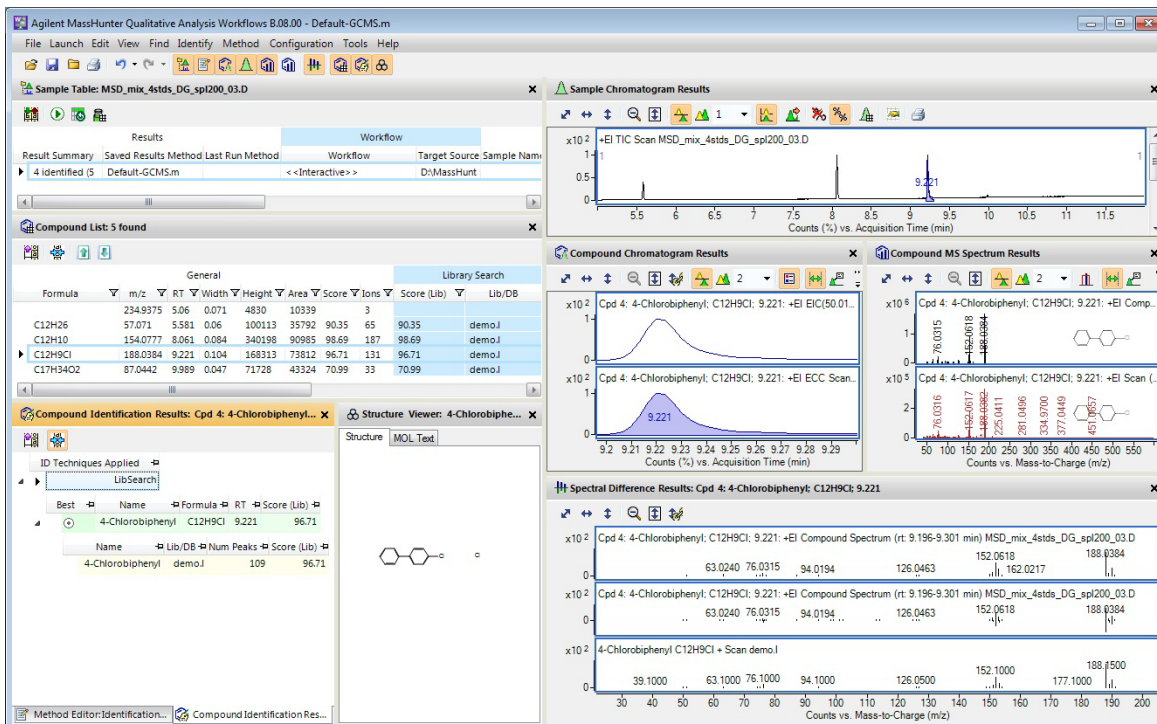


Рис. 32 Соединения и результаты поиска в библиотеках/базах данных

3 Закройте файл данных.

- Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных)**.
- Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.

- Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

2 Поиск и определение

Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Алгоритм поиска соединений по MRM (Find Compounds by MRM) определяет соединения среди данных MRM, полученных с помощью тройного квадруполя. Алгоритм осуществляет поиск соединений, используя переходы MRM. Все соединения, полученные этим методом, извлекаются и отображаются в списке соединений (Compound List). Соединения не исключаются из поиска на основании результатов интегрирования хроматограммы. Алгоритм поиска соединений по MRM (Find Compounds by MRM) можно использовать только с данными, полученными с использованием переходов MRM. Алгоритм MRM использует информацию, которая может быть найдена в файле данных, если этот файл данных — MRM.

Задание 13. Поиск соединений с использованием MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных Pest - STD 200 MRM.d в папке образцов файлов данных GC Pesticides (Пестициды ГХ).</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none">В пользовательском интерфейсе автоматически появляются функции в соответствии с открытым файлом данных.

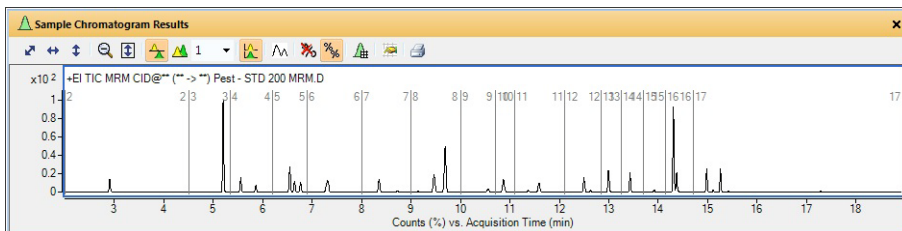


Рис. 33 Хроматограмма TIC из файла Pest - STD 200 MRM.d

Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Задание 13. Поиск соединений с использованием MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку ОК.</p>	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
3	<p>Поиск соединений с использованием алгоритма MRM.</p> <p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) > Find by MRM (Найти по MRM).</p> <p>b Проверьте параметры.</p>	

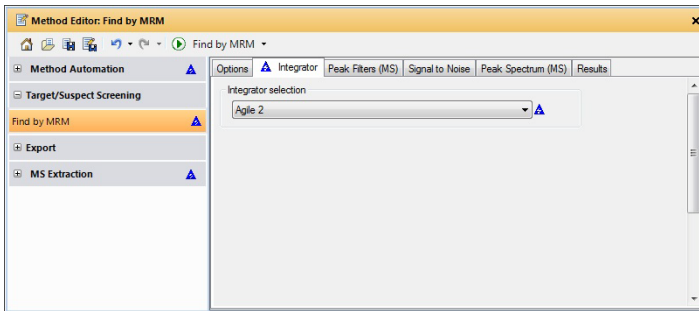





Рис. 34 Вкладка интегратора в разделе поиска по MRM (Find by MRM) редактора методов (Method Editor)

2 Поиск и определение

Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Задание 13. Поиск соединений с использованием MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	<p>c Щелкните  чтобы запустить алгоритм поиска по MRM (Find by MRM) в файле данных.</p> <p>d При необходимости щелкните команду View (Просмотр) > Compound List (Список соединений).</p> <p>e Если необходимо, перейдите на вкладку окна Compound Identification Results (Результаты определения соединений), чтобы отобразить его. Это окно разделено на вкладки окна редактора методов (Method Editor).</p>	<ul style="list-style-type: none">Программа Qualitative Analysis Workflows найдет 28 соединений, удовлетворяющих заданным условиям.
4 Изучите соединения. См. Рис. 35 на стр. 67.	<p>a Выберите 2 в поле Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка) на панели инструментов Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения).</p> <p>b Нажмите кнопку Hide Empty Columns (Скрыть пустые столбцы) () на панели инструментов Compound List (Список соединений).</p> <p>c Щелкните первое соединение в окне списка соединений (Compound List).</p> <p>d При активном окне списка соединений (Compound List) используйте клавиши со стрелками для перехода между соединениями.</p>	<ul style="list-style-type: none">Алгоритм Hide any currently empty columns (Скрыть все пустые в настоящий момент столбцы) выполняется на первом уровне таблицы.
5 Измените показанные столбцы в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results).	<p>a Щелкните правой кнопкой мыши строку в таблице, затем выберите пункт Add/Remove Columns (Добавить/Удалить столбцы).</p> <p>b Выберите пункт Select All (Выбрать все), затем — OK.</p> <p>c Нажмите кнопку Hide Empty Columns (Скрыть пустые столбцы) () на панели инструментов Compound List (Список соединений).</p> <p>d Щелкните столбец, который нужно удалить. Щелкните его правой кнопкой мыши, затем выберите пункт Remove Column (Удалить столбец), чтобы удалить этот столбец.</p> <p>e Закройте некоторые окна.</p>	<ul style="list-style-type: none">Если вы сначала вывели на экран все столбцы, а затем скрыли пустые, то будут показаны все столбцы, в которых есть значения.В окне результатов определения соединения (Compound Identification Results) в столбце Precursor (Acq) (Исходный (сбор)) отобразится исходный ион, а в столбце Поиск по дочернему иону MRM отобразится дочерний ион.Количество соединений показано в окне таблицы проб (Sample Table) в столбце сводных результатов (Result Summary).

Задание 13. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Задание 13. Поиск соединений с использованием MRM (только MRM)

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии

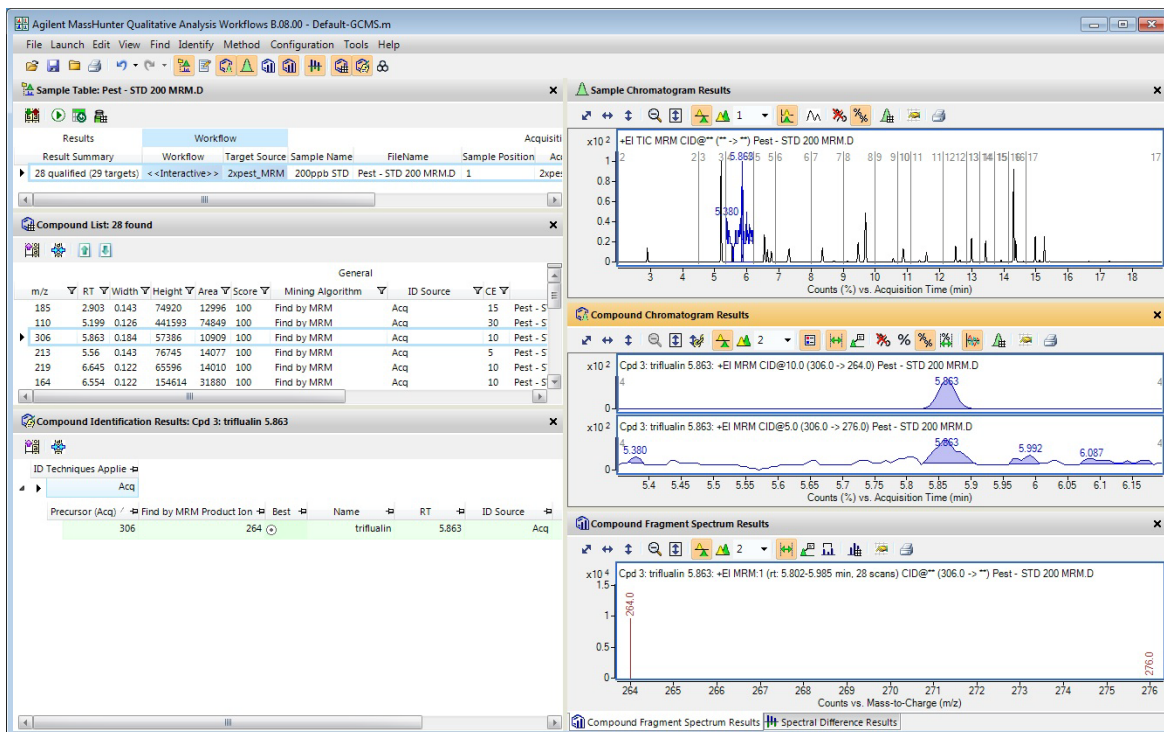


Рис. 35 Поиск по результатам MRM

6 Закройте файл данных.

a Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных)**.

b Щелкните **Close (Закреть)**.

• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

2 Поиск и определение

Задание 14. Найдите соединения по интегрированию

Задание 14. Найдите соединения по интегрированию

Алгоритм поиска соединений по интегрированию (Find Compounds by Integration) определяет соединения на основании результатов интегрирования. Соединение создается для каждого пика, определенного интегратором.

Задание 14. Поиск соединений с помощью интегрирования

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	

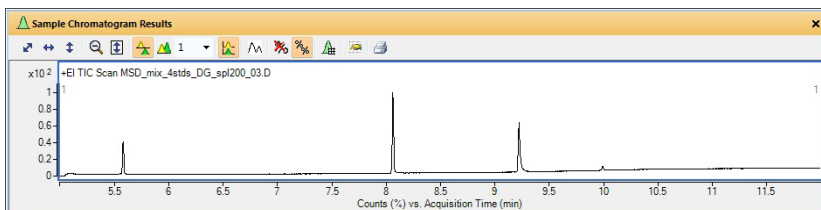


Рис. 36 Хроматограмма TIC из файла MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
---	--	--

Задание 14. Поиск соединений с помощью интегрирования

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
3	<p>Поиск соединений с использованием алгоритма интегрирования.</p> <p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Compound Discovery (Обнаружение соединения) > Find by Integration (Найти по интегрированию).</p> <p>b Проверьте параметры.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Можно выбрать отрезок хроматограммы, в котором вы предполагаете найти соединения.

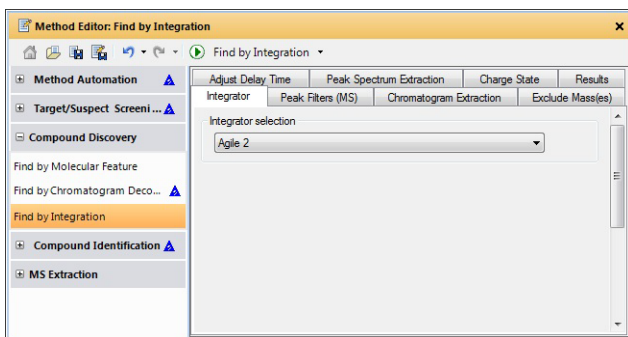



Рис. 37 Вкладка интегратора в разделе поиска по интегрированию (Find by Integration) редактора методов (Method Editor)

	<p>c Щелкните  для запуска алгоритма поиска соединений по интегрированию (Find Compounds by Integration) в файле данных.</p> <p>d При необходимости щелкните команду View (Просмотр) > Compound List (Список соединений).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Программа Qualitative Analysis Workflows найдет десять соединений, удовлетворяющих заданным условиям.
4	<p>Изучите соединения. См. Рис. 38 на стр. 70.</p> <p>a Щелкните значок Hide any currently empty columns (Скрыть все пустые в настоящий момент столбцы) в окне списка соединений (Compound List).</p> <p>b Щелкните первое соединение в окне списка соединений (Compound List).</p>	

2 Поиск и определение

Задание 14. Найдите соединения по интегрированию

Задание 14. Поиск соединений с помощью интегрирования

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	<p>с При активном окне списка соединений (Compound List) используйте клавиши со стрелками для перехода между соединениями.</p>	

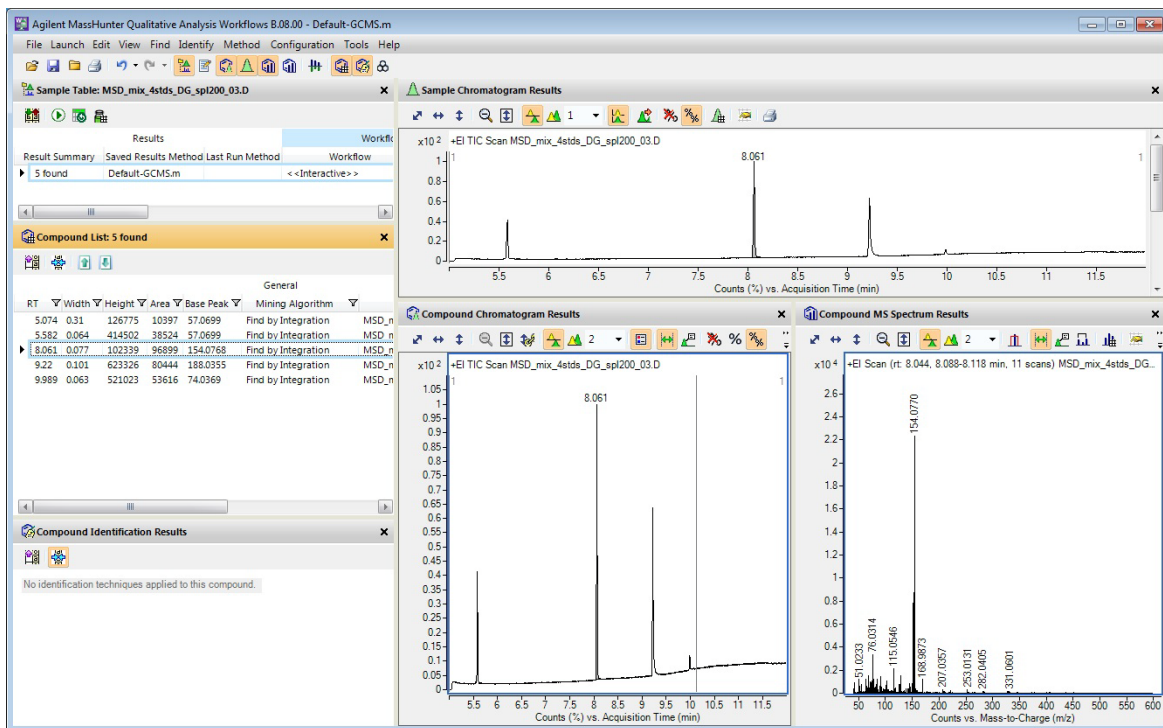


Рис. 38 Результаты поиска по интегрированию

5 Закройте файл данных.

- Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных)**.
- Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.
- Щелкните **Close (Закреть)**.

- Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

Задание 15. Поиск по фрагментам

В случае данных ЖХ/МС, полученных с помощью прибора TOF или Q-TOF в режиме MS-MS All Ions (Все ионы), алгоритм Find by Formula (Найти по формуле) позволяет выполнить дополнительный шаг – Fragment Confirmation (Подтверждение фрагмента). В этом шаге алгоритма программа пытается подтвердить идентификацию соединений путем поиска ионов фрагментов в высокоэнергетическом спектре, которые совместно элюируются с молекулярным ионом и которые предлагаются на основе фрагментов в библиотечном спектре для данного соединения.

Find by Fragments (Найти по фрагментам) – схожий алгоритм, предназначенный для данных EI ГХ/Q-TOF, в которых имеются только высокоэнергетические спектры, показывающие, как правило, ионы фрагментов и зачастую не содержащие значимого количества молекулярных ионов. Алгоритм вначале выбирает «n» фрагментных ионов из библиотеки спектров ЭУ-МС, в основе которой лежит интенсивность и величина m/z (предпочтение отдается фрагментным ионам с более высоким значением m/z , поскольку они содержат больше структурной информации). Затем алгоритм извлекает ионные хроматограммы этих ионов в промежутки времени, близкий к времени удерживания целевых веществ в библиотеке, и создает список хроматографических пиков целевых веществ. После этого он пытается найти группы пиков, объединяемых в кластеры по ВУ, и выбирает ион сравнения и ионы для подтверждения фрагмента. Ион сравнения может быть молекулярным ионом при его наличии, но это не является обязательным условием. Затем алгоритм вычисляет, насколько успешно проходит коэлюирование выбранных хроматографических пиков. Целевое соединение квалифицируется в том случае, если оказывается, что коэлюируют пики с количеством ионов, превышающим установленный пользователем минимальный порог.

Во всех случаях генерируется Cleaned HighE Scan, где показывается только ион сравнения и ионы для подтверждения фрагмента, которые могут сопровождаться своими подформулами в виде примечаний.

2 Поиск и определение

Задание 15. Поиск по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных Tomato_spiked.D.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных Tomato_spiked.d в папке образцов файлов данных GCMS Pesticide (Пестициды ГХ/МС).</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Общий рабочий процесс (General Workflow) используется при работе с данными ГХ/QQQ. При работе с данными ГХ/Q-TOF можно также использовать общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).

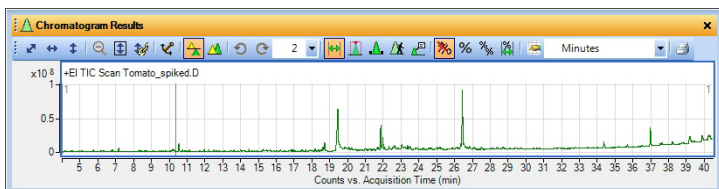


Рис. 39 Хроматограмма TIC из файла Tomato_spiked.d

2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <ul style="list-style-type: none"> Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию). 	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
3	<p>Загрузите файл метода GCQTOF_Pesticide_Example.m.</p> <p>a Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>b Выберите метод GCQTOF_Pesticide_Example.m и нажмите кнопку Open (Открыть).</p> <p>c Щелкните вкладку Method Editor (Редактор методов) в нижнем левом углу окна программы.</p> <p>d Если в поле Target Source (Источник целевого соединения) в разделе Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) > Find by Fragments (Найти по фрагментам) появилась ошибка, исправьте путь.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Этот метод установлен в папке <code>\\MassHunter\methods\B.08.00</code>. Синие треугольники, отображаемые при загрузке метода, пока можно игнорировать. Если есть ошибки, обозначенные красным цветом, исправьте их.

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
<p>4 Сохраните метод в <i>iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m</i>, где «<i>iii</i>» — ваши инициалы.</p>	<p>a В верхнем меню выберите Method (Метод) > Save As (Сохранить как).</p> <p>b Наберите iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m.</p> <p>c Нажмите кнопку Save (Сохранить).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Обратите внимание, что сохранение метода приведет к тому, что исчезнут все голубые треугольники, означающие изменение значений в открытом методе.
<p>5 Проверьте параметры для алгоритма поиска по фрагментам (Find by Fragments).</p>	<p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) > Find by Fragments (Найти по фрагментам).</p> <p>b Перейдите на вкладку Target Source (Источник целевого соединения).</p> <p>c Выберите библиотеку Pesticide_Example.cdb в папке PCDL.</p> <p>d Перейдите на вкладку Match Tolerance (Допуск для соответствия).</p> <p>e Выберите Symmetric (ppm) (Симметричные (ppm)) для Possible m/z (Возможные m/z) и просмотрите значение.</p> <p>f Поставьте флажок в поле Limit EIC extraction range (Ограничить диапазон экстракции EIC), выбрать Symmetric (Симметричные) и указать значение 1, 0 в поле Expected retention time (Ожидаемое время удерживания).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Эти значения уже установлены в методе-примере. • Значение, выбранное в поле Possible m/z (Возможные m/z), может зависеть от того, выполняется ли метод сбора данных в режиме высокого разрешения или в режиме удвоенного коэффициента передачи.

2 Поиск и определение

Задание 15. Поиск по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

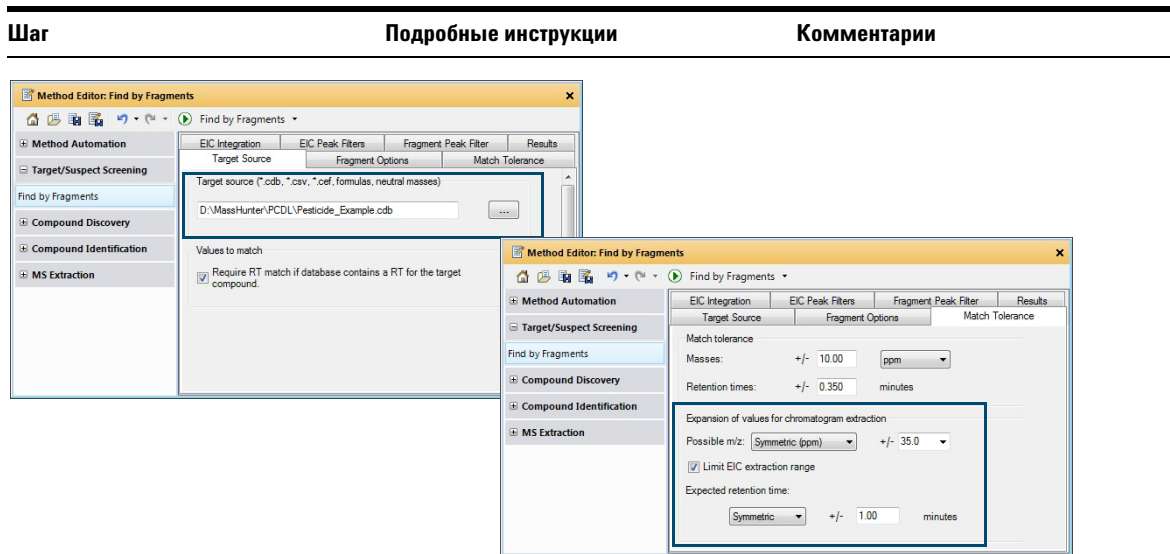


Рис. 40 Вкладки **Target Source (Источник целевого соединения)** и **Match Tolerance (Допуск для соответствия)** в разделе поиска по фрагментам (Find by Fragments)

- g Перейдите на вкладку **Fragment Options (Параметры фрагментов)**.
 - h Нажмите **Use spectral library only (Использовать только библиотеку спектров)** и укажите значение 7 в поле **Number of most specific ions from spectral library (Количество наиболее специфичных ионов из библиотеки спектров)**.
 - i Укажите значение 0, 2 в поле **RT difference (Разница ВУ)**.
- Большое количество ионов обеспечивает большую специфичность и большую уверенность в результатах; однако большее количество ионов приводит к увеличению времени выполнения программы.
 - Рекомендуемый диапазон для поля **RT difference (Разница ВУ)** составляет 0,1–0,2. Эта величина представляет собой разницу, допустимую при изменении времени удерживания иона сравнения. Ион сравнения автоматически выбирается программой Qualitative Workflows.

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
j	Снимите флажок с пункта S/N ratio (Соотношение сигнал/шум) .	<ul style="list-style-type: none"> • Если установлен флажок S/N ratio (Соотношение сигнал/шум), то есть большая вероятность получения ложноотрицательных результатов (если соотношение слишком низкое). • Рекомендуемое начальное значение находится в промежутке между 1 и 3. При установке значения 1 требуются два квалифицированных иона: ион сравнения и квалифицированный ион. • Менять значения в остальных вкладках не надо.
k	Укажите значение 70 в поле Coelution score (Степень коэлюирования) .	
l	Щелкните по полю Minimum number of qualified fragments (Минимальное количество квалифицированных фрагментов) и укажите значение 1.	

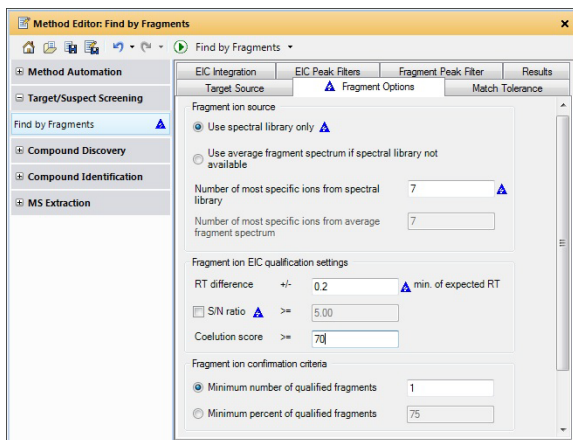




Рис. 41 Вкладка **Fragment Options (Параметры фрагментов)** в разделе поиска по фрагментам (**Find by Fragments**)

- | | | |
|--|--|--|
| <p>6 Запустите алгоритм поиска по фрагментам (Find by Fragments).</p> | <ul style="list-style-type: none"> • Выберите  чтобы запустить алгоритм поиска по фрагментам (Find by Fragments) в файле данных. • Выберите пункты Find (Найти) > Find by Fragments (Найти по фрагментам). | <ul style="list-style-type: none"> • Программа Qualitative Workflows найдет пять соединений, удовлетворяющих значениям параметров. |
|--|--|--|

2 Поиск и определение

Задание 15. Поиск по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
7 Сохраните метод.	<ul style="list-style-type: none">Сохраните метод одним из трех способов:<ul style="list-style-type: none">Щелкните значок Save Method (Сохранить метод) в редакторе методов (Method Editor). Щелкните правой кнопкой мыши на редакторе методов (Method Editor) и выберите Save Method (Сохранить метод).В верхнем меню выберите Method (Метод) > Save (Сохранить).	

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
8 Изучите соединения. См. Рис. 42.	<p>a Выберите вкладку Compound Identification Results (Результаты определения соединений), если она не открыта.</p> <p>b Закройте окно средства просмотра структуры (Structure Viewer).</p> <p>c Выберите пункты View (Просмотр) > Compound Fragment Spectrum Results (Результаты для спектра фрагмента соединения).</p> <p>d В окне Compound List (Список соединений) щелкните правой кнопкой мыши по заголовку столбца, который необходимо удалить, и выберите пункт Remove Column (Удалить столбец).</p>	<ul style="list-style-type: none"> При выборе соединения в окне списка соединений (Compound List) отображаются результаты в других окнах.

2 Поиск и определение

Задание 15. Поиск по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии

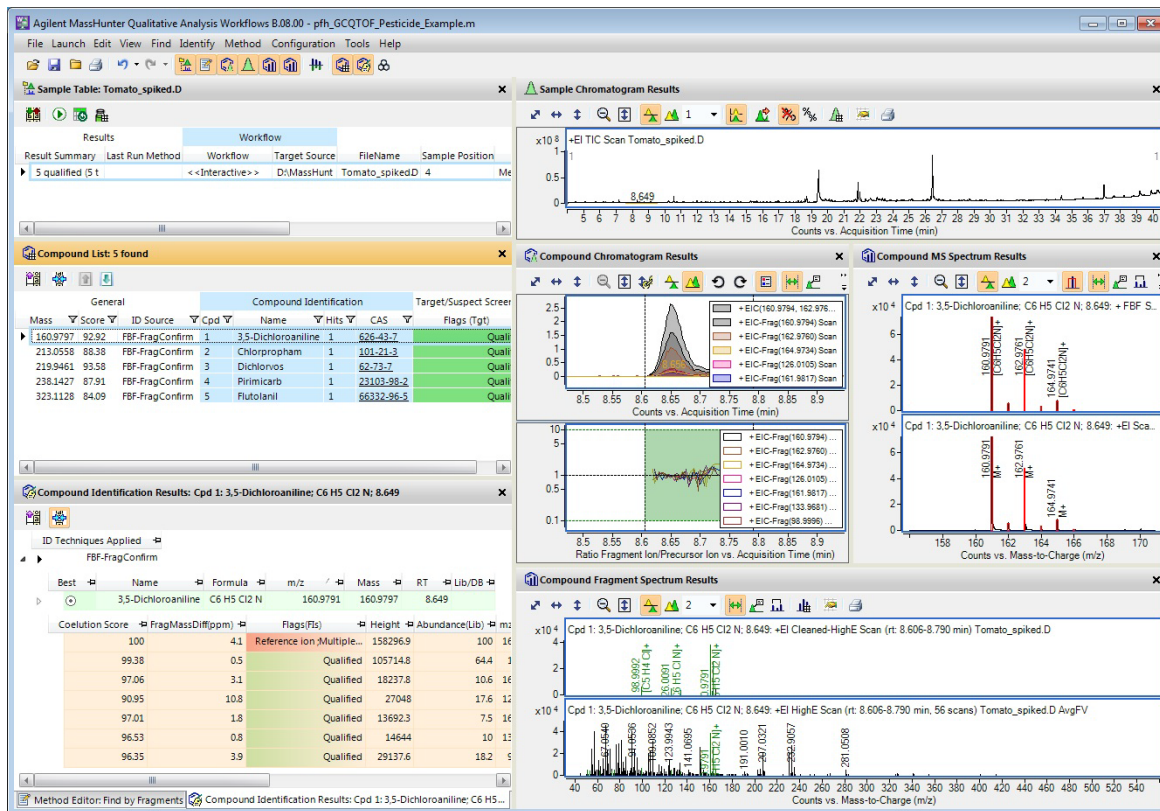



Рис. 42 Результаты поиска по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
e	Чтобы сменять соединения в списке соединений (Compound List) и просматривать их по очереди, щелкните их мышью или воспользуйтесь клавишами со стрелками.	<ul style="list-style-type: none"> Первый уровень таблицы показывает краткую информацию по всем выполняемым идентификационным алгоритмам. Второй уровень (синий) показывает отдельные значения, использованные для получения общего значения. Эта строка появляется только при нахождении молекулярного иона. Она показывает, насколько точно этот ион соответствует ожидаемой массе, времени удерживания и распределению изотопа целевого соединения. Таблица внизу показывает фрагментные ионы и их степени коэлюирования. Она также несет в себе информацию о квалификации фрагмента.
f	Просмотрите информацию в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results).	
g	Щелкните значок стрелки в начале строки, чтобы развернуть уровень в таблице. После разворачивания уровня таблицы значок изменится на  -.	

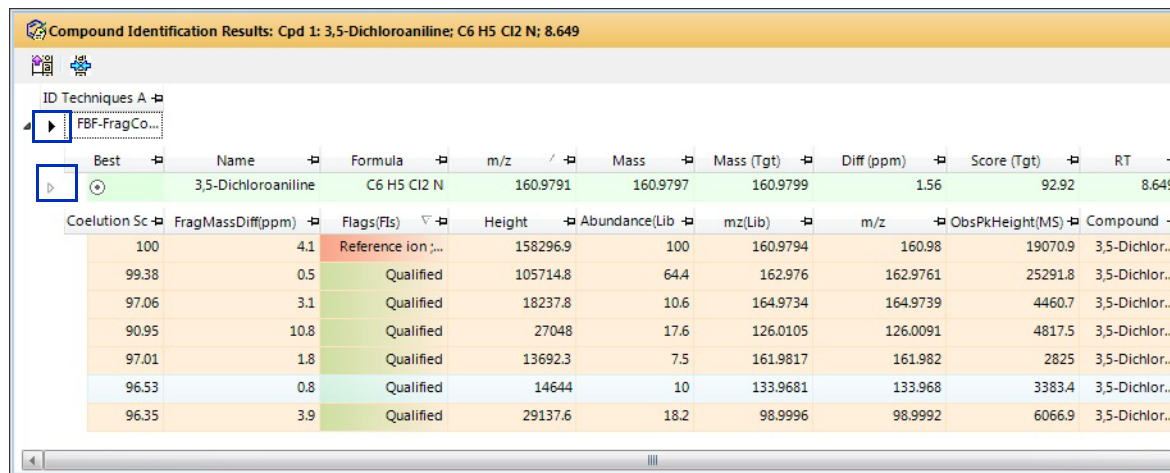
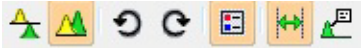


Рис. 43 Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений)

2 Поиск и определение

Задание 15. Поиск по фрагментам

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	<p>h Просмотрите результаты в окне результатов Compound Chromatogram (Хроматограмма соединения).</p> <p>i Убедитесь, что отображается панель Coelution Plot (График коэлюирования).</p> <p>j Убедитесь, что выполнено наложение хроматограмм. Значки на панели инструментов расположены в следующем порядке:</p> 	<ul style="list-style-type: none"> В окне Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения) отображаются отдельные графики по ионам для каждого фрагментного иона. В нем также отображается график коэлюирования, который показывает, насколько близко фрагментные ионы коэлюируют с соединением. Для справки представлена черная линия, показывающая значение y, равное 1. Значение 1 показывает, что квалификационные ионы коэлюируют вместе с хроматограммой иона сравнения. При приближении соотношения к 1 происходит более близкое коэлюирование с ионом сравнения.

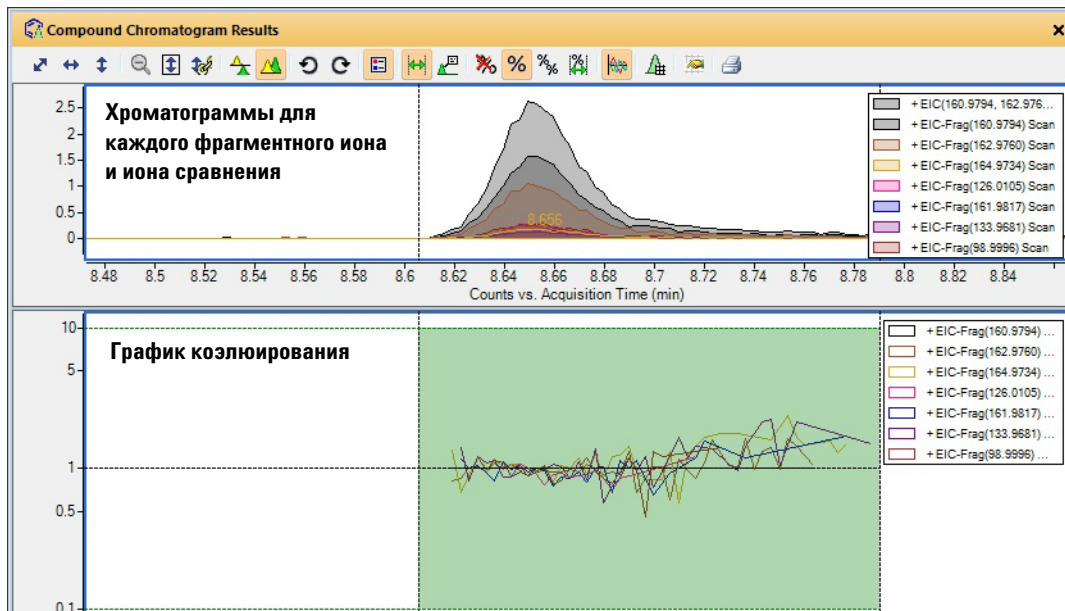


Рис. 44 Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений)

Задание 15. Поиск по фрагментам

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
9 Закройте файл данных.	<p>a Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных).</p> <p>b Ответьте No (Нет) на вопрос о сохранении результатов.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

2 Поиск и определение

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

В процессе выполнения этого задания будут сначала осуществляться интегрирование и извлечение спектров пиков из файла данных ГХ/Q-TOF, Используйте программу MassHunter Qualitative Analysis Navigator, а затем — создаваться возможные формулы для каждого спектра пиков.

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте TIC для файла данных MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d .	<p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Navigator. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Если пункт Load result data (Загрузить результаты) недоступен, это значит, что результаты не были сохранены в файле данных. См. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89 для получения инструкций по сохранению результатов.• Общий рабочий процесс загружен.
2 Настройте пользовательский интерфейс.	<p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите <i>Default-GCMS.m</i>.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
3 Интегрирование и извлечение спектров пиков.	<p>a Выберите пункты View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов).</p> <p>b Выберите раздел Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS) (Интегрировать (МС)) в окне редактора методов (Method Editor).</p> <p>c Перейдите на вкладку Peak Filters (Фильтры пиков).</p> <p>d Нажмите кнопку Peak height (Высота пика).</p> <p>e Отметьте пункт Relative height (Относительная высота).</p> <p>f Выберите пункты Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков).</p>	


2 Поиск и определение

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4	<p>Выполните поиск спектров для пиков 1–4 в библиотеке.</p>	
	<p>a В окне навигатора по данным (Data Navigator) щелкните Spectra (Спектры).</p> <p>b В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Identify Spectra (Определить спектры) > Identification Workflow (Рабочий процесс определения).</p> <p>c Установите флажок Identify by - Library / Database search (Определение с помощью: поиск в библиотеках и базах данных).</p> <p>d Укажите значение 50 в поле Score (rev) (Степень (назад)) для demo.1.</p> <p>e Выберите раздел Identify Spectra (Определить спектры) > Library Search Settings (Настройки поиска в библиотеке).</p> <p>f Перейдите на вкладку Peak Filters (Фильтры пиков).</p> <p>g Снимите флажок Absolute Height (Абсолютная высота) на вкладке Peak Filters (Фильтры пиков).</p> <p>h В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Identify Spectra (Определить спектры) > Generate Formulas (Создать формулы).</p> <p>i Перейдите на вкладку Fragment Formulas (Формулы фрагментов).</p> <p>j Установите флажок Annotate fragment spectrum peaks with formulas (Добавить формулы к пикам спектра фрагмента).</p> <p>k Выберите пункты Identify (Определить) > Search Library/DB for Spectra (Поиск спектров в библиотеке/базе данных) в главном меню.</p> <p>l Закройте окно редактора методов (Method Editor).</p>	<ul style="list-style-type: none">• В рабочем процессе определения могут использоваться несколько библиотек и баз данных.• Если выбрать пункт Search all libraries/databases (Поиск во всех библиотеках/базах данных), алгоритм вернет совпадения из всех библиотек.• Если на вкладке Fragment Formulas (Формулы фрагментов) в разделе Identify Spectra (Определить спектры) > Generate Formulas (Создать формулы) установлен флажок Annotate fragment spectrum peaks with formulas (Добавить формулы к пикам спектра фрагмента), то к спектрам в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results) добавляются примечания пиков при выборе пунктов Identify (Определить) > Search Library / DB for Spectra (Поиск спектров в библиотеке/базе данных).• Score (fwd) (Степень (вперед)) — это минимальное значение степени совпадения при поиске с направлением вперед. Score (rev) (Степень (назад)) — это минимальное значение степени совпадения при поиске с направлением назад.

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5 Измените видимые столбцы.	<p>a Щелкните правой кнопкой мыши на окне результатов определения спектров (Spectrum Identification Results), а затем щелкните Add/Remove Columns (Добавить/Удалить столбцы). В диалоговом окне Add/Remove Columns (Добавить/удалить столбцы) отметьте столбцы, которые нужно показать. Нажмите кнопку ОК.</p> <p>b Щелкните значок Hide any currently empty columns (Скрыть все пустые в настоящий момент столбцы) () в окне результатов определения спектра (Spectrum Identification Results).</p>	

2 Поиск и определение

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
6 Рассмотрите результаты.	<ul style="list-style-type: none">Просмотрите формулы и типы ионов, которые отобразятся поверх каждого пика в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results).	<ul style="list-style-type: none">Когда навигатор по данным (Data Navigator) находится в фокусе, можно с помощью клавиш со стрелками вверх и вниз переходить между спектрами.Обратите внимание: двухцветное отображение ионов фрагментов с примечаниями (зеленым) и «других» ионов (красным в данном случае) доступно только тогда, когда включена функция примечаний к фрагментам. Если виден только зеленый цвет, вы можете изменить цвет спектра (Edit (Изменить) > Choose Defined Color (Выбрать заданный цвет)), чтобы применить два цвета.

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии

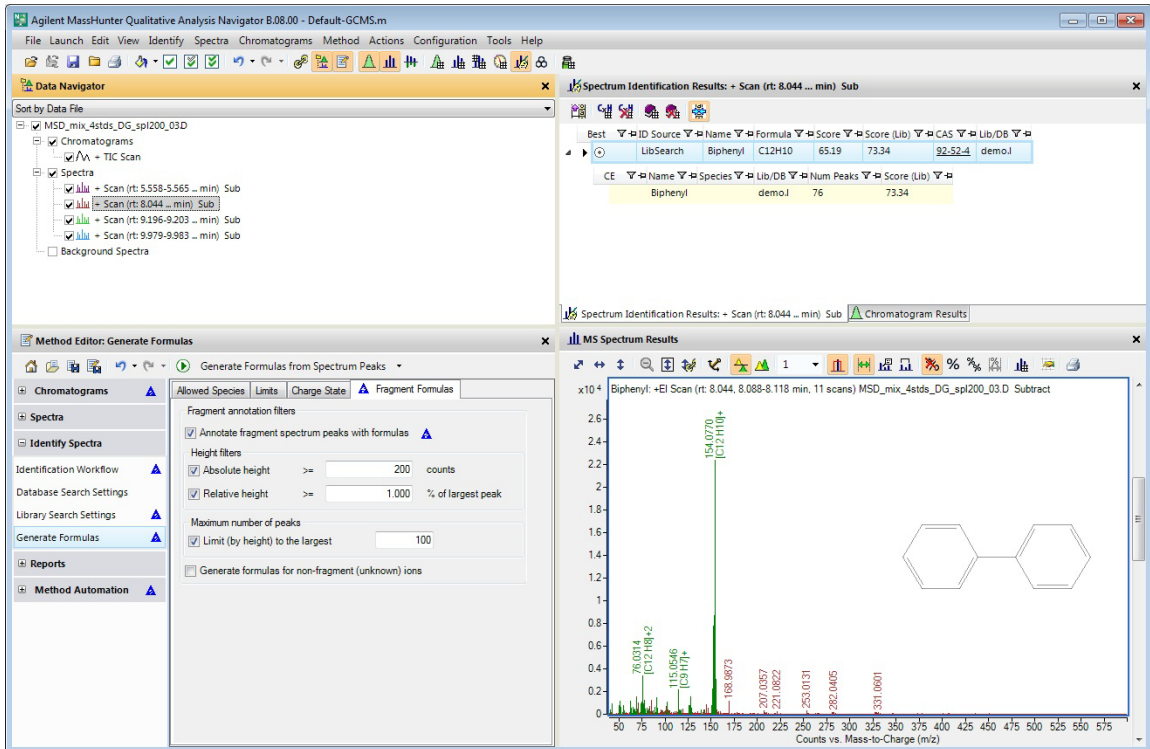


Рис. 45 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

2 Поиск и определение

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Задание 16. Поиск масс-спектров в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
7	<p>Рассмотрите результаты для каждого спектра в окне пиков МС (MS Peaks One).</p> <ol style="list-style-type: none">Щелкните View (Просмотр) > MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 спектров пиков МС).Щелкните правой кнопкой мыши, а затем выберите пункт Add/Remove Columns (Добавить/удалить столбцы).Убедитесь, что столбцы, отображенные в Рис. 46, также присутствуют в списке Show these columns (Показать эти столбцы).Выполните сортировку по столбцу Ion Type (Тип ионов).Если тип ионов - фрагмент (Fragment Ion), формулы и типы ионов отображаются зеленым цветом на каждом пике в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results).	<ul style="list-style-type: none">Поле типа ионов (Ion Type) может иметь значения: молекулярный (Molecular Ion), фрагмент (Fragment Ion) или быть пустым. В случае фрагментных ионов (Fragment Ion) в столбце формулы потеря (Loss Formula) и массы потеря (Loss Mass) отображаются формула и масса, необходимые для получения такого иона из молекулярного иона. «Формулы и типы ионов» отображает информацию для этого иона.

m/z	Species	Abund	Formula & Ion Species	Diff (ppm)	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type	Area	End	Start
77.0383	M+2	911.4	[C12 H10]+2	3.71			Molecular Ion	18	77.0791	77.0185
154.077	M+	22388.05	[C12 H10]+	4.28			Molecular Ion	669	154.1769	153.9911
155.0808	M+	3071.64	[C12 H10]+	1.64			Molecular Ion	98	155.1362	155.0143
41.0405	M+	395.33	[C3 H5]+	-46.69	C9H5	113	Fragment Ion	5	41.0629	41.0297
43.0548	M+	958.84	[C3 H7]+	-12.17	C9H3	111	Fragment Ion	15	43.0979	43.0375
50.0157	M+	794.64	[C4 H2]+	-12.68	C8H8	104.1	Fragment Ion	11	50.0588	50.0018
51.0233	M+	1233.15	[C4 H3]+	-6.79	C8H7	103.1	Fragment Ion	21	51.0781	50.9917
52.0299	M+	627.86	[C4 H4]+	17.02	C8H6	102	Fragment Ion	12	52.062	52.0163
55.0553	M+	832.37	[C4 H7]+	-19.56	C8H3	99	Fragment Ion	15	55.0913	55.0229
56.0599	M+	332.43	[C4 H8]+	37.83	C8H2	98	Fragment Ion	5	56.0956	56.0353
63.0231	M+2	1192.42	[C10 H6]+2	-3.04	C2H4	28	Fragment Ion	20	63.0735	63.0004
63.5252	M+2	12488	[C10 H6]+2	-9.52	C2H4	28	Fragment Ion	2	63.5407	63.504
64.0316	M+	536.52	[C5 H4]+	-13.2	C7H6	90	Fragment Ion	10	64.0741	64.0188
65.0385	M+	646.84	[C5 H5]+	0.98	C7H5	89	Fragment Ion	13	65.0826	65.0129
66.0461	M+	391.73	[C5 H6]+	5.3	C7H4	88	Fragment Ion	8	66.0943	66.0287
67.0542	M+	448.98	[C5 H7]+	0.52	C7H3	87	Fragment Ion	6	67.0807	67.043
68.0586	M+	226.76	[C5 H8]+	50.16	C7H2	86	Fragment Ion	6	68.084	68.027

Рис. 46 Таблица 1 пиков МС (MS Peaks One) содержит столбцы: **Ion Type (Тип ионов)**, **Loss Formula (Формула потеря)**, **Loss Mass (Масса потеря)**, и **Formula & Ion Species (Формулы и типы ионов)**

- (необязательно) Закройте файл данных.
 - Чтобы узнать, как сохранять результаты, перейдите к следующему заданию.
 - Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных)**.
 - Щелкните **Close (Закреть)**.
- Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 17. Сохраните результаты» на стр. 89.

Задание 17. Сохраните результаты

В процессе выполнения этого задания будет осуществляться сохранение результатов для текущего файла данных.

Задание 17. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Сохраните результаты для текущего файла данных и закройте его.</p>	<p>a Щелкните File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты).</p> <p>b Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Имея один файл данных можно сохранить только один набор результатов. При повторном сохранении результатов с помощью команды File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты) для текущего файла данных, новые данные будут записаны поверх данных предыдущего сохранения.
<p>2 Откройте файл данных и загрузите результаты.</p>	<p>a Щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных). Откроется диалоговое окно Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных. Для этого примера выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d.</p> <p>c Отметьте пункт Load result data (Загрузить данные результатов).</p> <p>d Нажмите кнопку Open (Открыть).</p>	

2 Поиск и определение

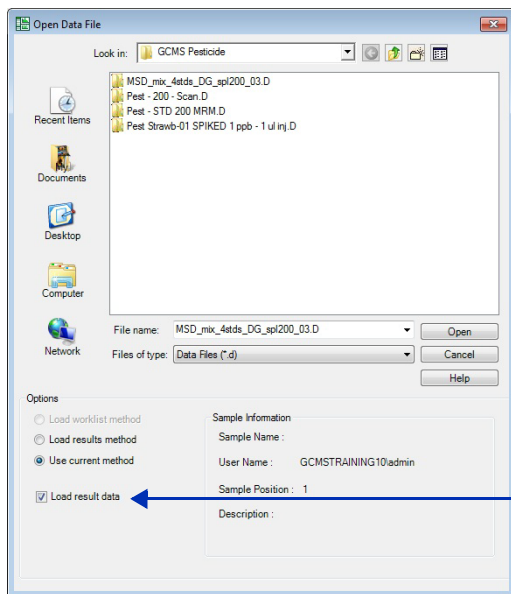
Задание 17. Сохраните результаты

Задание 17. Сохраните результаты

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии



Пункт Load result data (Загрузить данные результатов) должен быть отмечен.

Рис. 47 Откройте диалоговое окно Open Data File (Открыть файл данных)

- 3 Изучите результаты.
 - a Щелкните на окне **результатов определения спектров (Spectrum Identification Results)**.
 - b Рассмотрите результаты.

Задание 17. Сохраните результаты

Шаг

Подробные инструкции

Комментарии

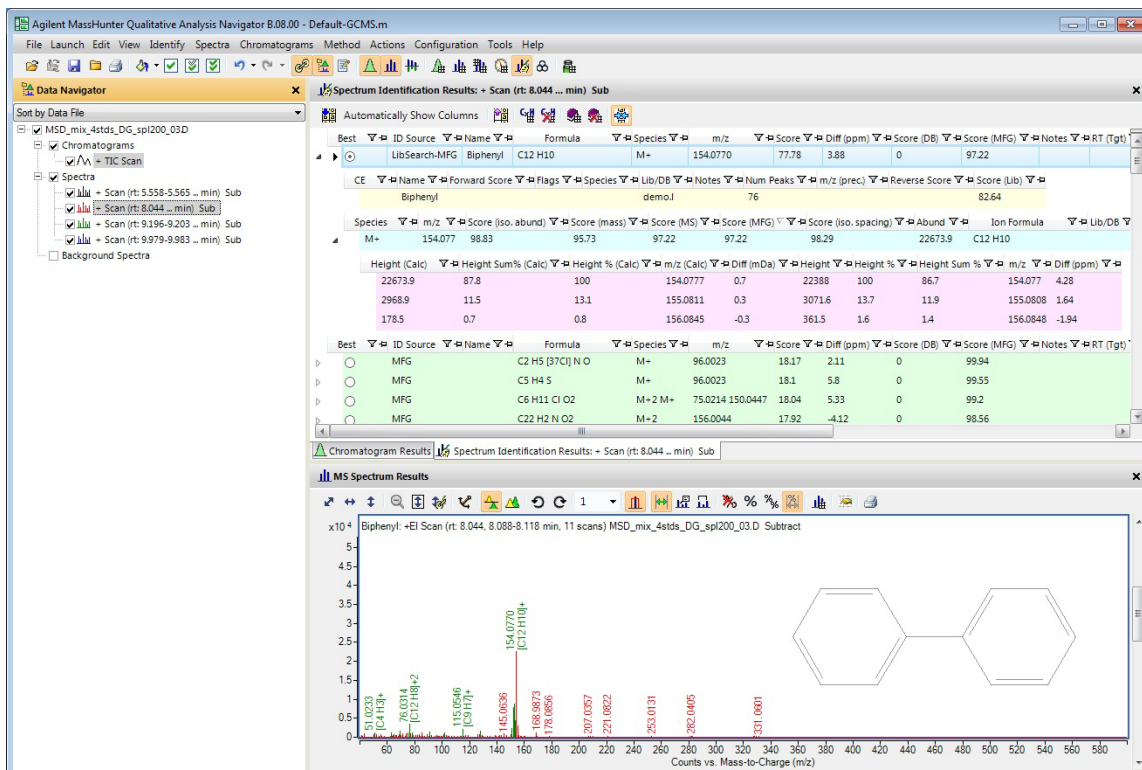


Рис. 48 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

- 4 Закройте файл данных.
 - a Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных)**.
 - b Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.

2 Поиск и определение

Задание 17. Сохраните результаты

Задание 17. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5	<p>Снова откройте файл данных, но не загружайте результаты.</p> <p>a Щелкните File (Файл) > Open (Открыть). Откроется диалоговое окно Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных. Для этого примера выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты).</p> <p>d Нажмите кнопку Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Если не загружать результаты, при открытии файла данных по умолчанию откроется TIC.

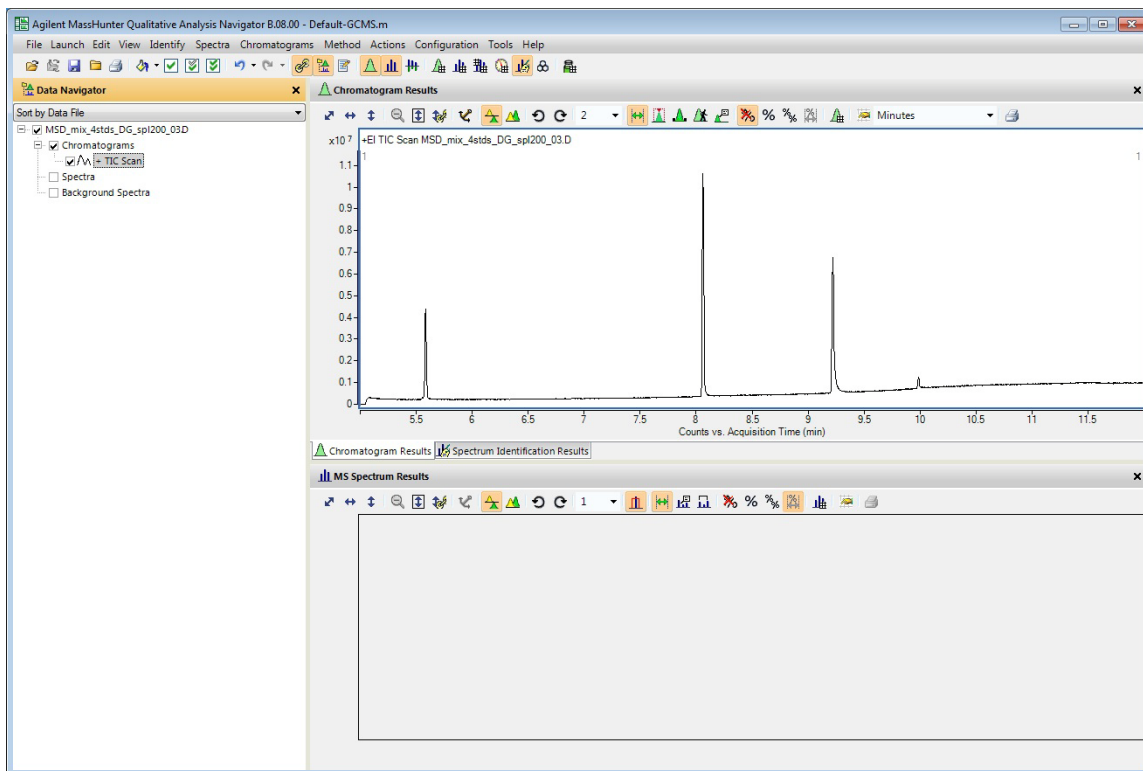


Рис. 49 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

Задание 17. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
6	Закройте файл данных. a Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных) . b Щелкните No (Нет) .	

2 Поиск и определение

Задание 17. Сохраните результаты



Упражнение 3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

- Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) 96
- Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery) 101
- Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow) 105
- Задание 21. Экспортируйте файл CEF 110
- Задание 22. Печать отчета об анализе 114
- Задание 23. Печать отчета по соединениям 119

В этих заданиях вы научитесь настраивать и выполнять рабочий процесс.

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 вы найдете советы и дополнительную информацию о каждом этапе упражнения.



3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

При первом использовании программы Программа качественного анализа Workflows загружается метод default.m. В случае ГХ/МС лучше начать с метода Default-GCMS.m. Вы можете внести изменения в открытый метод и сохранить его или открыть новый метод, внести изменения и сохранить этот метод. Вы не можете перезаписать метод Default.m или Default-GCMS.m.

В программе Qualitative Analysis Navigator можно выполнить только пользовательский рабочий процесс (Custom Workflow). В программе Qualitative Analysis Workflows можно выполнить любой рабочий процесс, однако нельзя выполнить некоторые действия в пользовательском рабочем процессе (Custom Workflow). Изменять параметры анализа соединений можно только в программе Qualitative Workflows. В этом задании используйте программу Qualitative Workflows.

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных Tomato_spiked.d .	<p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных Tomato_spiked.d в папке образцов файлов данных GCMS Pesticide (Пестициды ГХ/МС).</p> <p>c Снимите флажок Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none">• В случае файлов данных ГХ/MRM вы можете использовать рабочий процесс Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) или Custom (Пользовательский).• В случае файлов ГХ/TOF и ГХ/Q-TOF вы можете использовать рабочий процесс Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений), Compound Discovery (Обнаружение соединения) или Custom (Пользовательский).• При выборе варианта Custom (Пользовательский) некоторые действия будут недоступны в программе Qualitative Workflows.

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

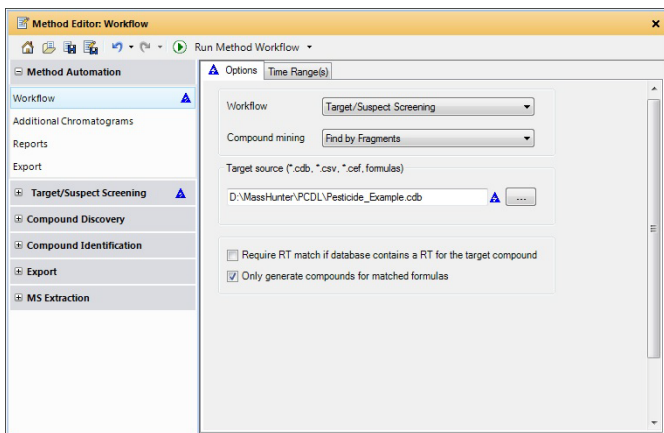
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Настройте пользовательский интерфейс.	<p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
3 Настройте метод для выполнения рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений). <ul style="list-style-type: none"> Выберите default_GC.csv в качестве целевого объекта. 	<p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс).</p> <p>b В качестве рабочего процесса (Workflow) выберите Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений).</p> <p>c При необходимости выберите алгоритм Compound mining (Анализ соединений). В этом примере доступен только вариант Find by Fragments (Найти по фрагментам).</p> <p>d Выберите Pesticide_Example.cdb в пункте Target source (Источник целевого соединения).</p> <p>e Установите флажок Only report qualified compounds (Показывать только соответствующие соединения).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Когда открыты только файлы данных ГХ/Q-TOF или ГХ/TOF, для рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) доступен только один алгоритм анализа соединений (Compound Mining) — Find by Fragments (Найти по фрагментам). Когда открыты только файлы данных MRM, для рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) доступен только один алгоритм анализа соединений (Compound Mining) — Find by MRM (Найти по MRM). Когда вы изменяете параметр Target source (Источник целевого соединения) в разделе Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс), также изменяется параметр Target source (Источник целевого соединения) на вкладке Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений) > Find by Fragments (Найти по фрагментам) > Target Source (Источник целевого соединения).

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)


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



Можно изменить параметры в разделе **Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)**.


Вы можете щелкнуть значок **«Сохранить метод» (Save Method)**, чтобы сохранить текущий метод.

Рис. 50 Раздел Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс)

- | | | |
|--|---|--|
| <p>4 Протестируйте рабочий процесс: должны быть найдены и квалифицированы пять соединений.</p> | <ul style="list-style-type: none">Щелкните значок Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода) . Либо можно выбрать пункты Method (Метод) > Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода). | <ul style="list-style-type: none">Если выбрать пункты Method (Метод) > Run Method Automation (Workflow + Reports) (Запустить автоматизацию метода (рабочий процесс + отчеты)), то сначала будет выполнен рабочий процесс метода, затем будут созданы отчеты. |
| <p>5 Сохраните метод в <i>iii_GCexercise1</i>, где <i>«iii»</i> — ваши инициалы.</p> | <ul style="list-style-type: none">a В верхнем меню выберите Method (Метод) > Save As (Сохранить как).b Укажите название <i>iii_GCexercise1.m</i>.c Нажмите кнопку Save (Сохранить). | <ul style="list-style-type: none">Обратите внимание, что сохранение метода приведет к тому, что исчезнут все голубые треугольники, означающие изменение значений в открытом методе.Вы можете щелкнуть значок «Сохранить метод» (Save Method), чтобы сохранить текущий метод. |

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Задание 18. Настройка и выполнение рабочего процесса Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Рассмотрите результаты.	<p>a Закройте окно средства просмотра структуры (Structure Viewer).</p> <p>b Выберите пункты View (Просмотр) > Compound Fragment Spectrum Results (Результаты для спектра фрагмента соединения).</p> <p>c При необходимости щелкните значок наложения (Overlaid)  в окне результатов хроматограммы соединения (Compound Chromatogram Results).</p> <p>d Щелкните второе соединение в окне списка соединений (Compound List).</p> <p>e Просмотрите другие соединения, чтобы оценить результаты.</p> <p>f Закройте файл данных.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Режим наложения соединений (Compound Overlay) включен. Красная хроматограмма в окне результатов хроматограммы пробы (Sample Chromatogram Results) относится ко второму соединению.

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)

В этом задании вы настроите метод качественного анализа для выполнения рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery). В ходе этого рабочего процесса запускается выбранный алгоритм анализа соединения и алгоритмы определения, которые вы отметили.

В программе Qualitative Analysis Navigator можно выполнить только пользовательский рабочий процесс (Custom Workflow). В программе Qualitative Analysis Workflows можно выполнить любой рабочий процесс, однако нельзя выполнить некоторые действия в пользовательском рабочем процессе (Custom Workflow). Изменять параметры анализа соединений можно только в программе Qualitative Workflows. В этом задании используйте программу Qualitative Workflows.

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis). В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Щелкните MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке образцов файлов данных GCMS Pesticide (Пестициды ГХ/МС).</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	
2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Настройте метод для выполнения рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery).	<p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс).</p> <p>b В качестве рабочего процесса (Workflow) выберите Compound Discovery (Обнаружение соединений). По умолчанию в разделе алгоритма Compound mining (Анализ соединения) выбрано значение Auto-Select Compound Mining (Автовыбор анализа соединений) и установлен флажок Identify by Library/Database search (Определение с помощью: поиск в библиотеках и базах данных). По умолчанию флажок Identify by - Formula generation (Определение с помощью: создание формулы) не установлен.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Функция Auto-Select Compound Mining (Автовыбор анализа соединений) выбирает наилучший из доступных алгоритмов анализа соединений в соответствии с типом файла данных, который анализируется.• Для этого метода в таблице указаны два файла библиотеки/базы данных.

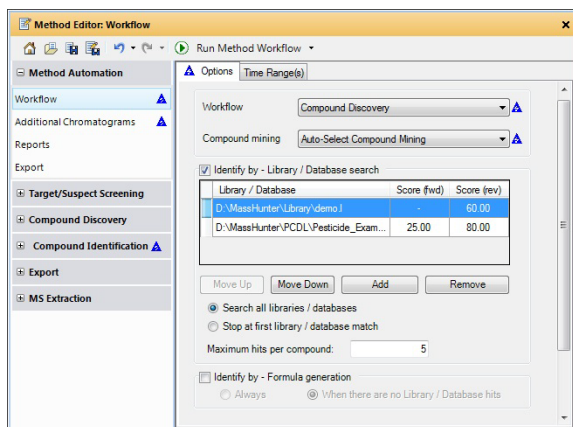



Рис. 52 Раздел Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс) при выбранном рабочем процессе (Workflow) Compound Discovery (Обнаружение соединений)

- 4 Сохраните метод в *iii_GCexercise2*, где «*iii*» — ваши инициалы.
- В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save As (Сохранить как)**.
 - Укажите название *iii_GCexercise2*.
 - Нажмите кнопку **Save (Сохранить)**.

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Протестируйте рабочий процесс.	<p>a Для запуска рабочего процесса щелкните значок Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода) . Либо можно выбрать пункты Method (Метод) > Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода) или Method (Метод) > Run Method Automation (Workflow and Reports) (Запустить автоматизацию метода (рабочий процесс и отчеты)).</p> <p>b Рассмотрите результаты. Найдено 26 соединений и определено четыре наиболее распространенных из них. Эта информация указана в столбце Result Summary (Сводные результаты) в таблице проб (Sample Table).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Когда вы выполняете метод в ходе рабочего процесса сбора данных, выполняется рабочий процесс и создается отчет. • После настройки метода нажмите кнопку Run (Выполнить). Система запустит алгоритм анализа соединений и попытается определить все соединения с помощью точного поиска массы в базе данных и сопоставления с библиотекой спектров.

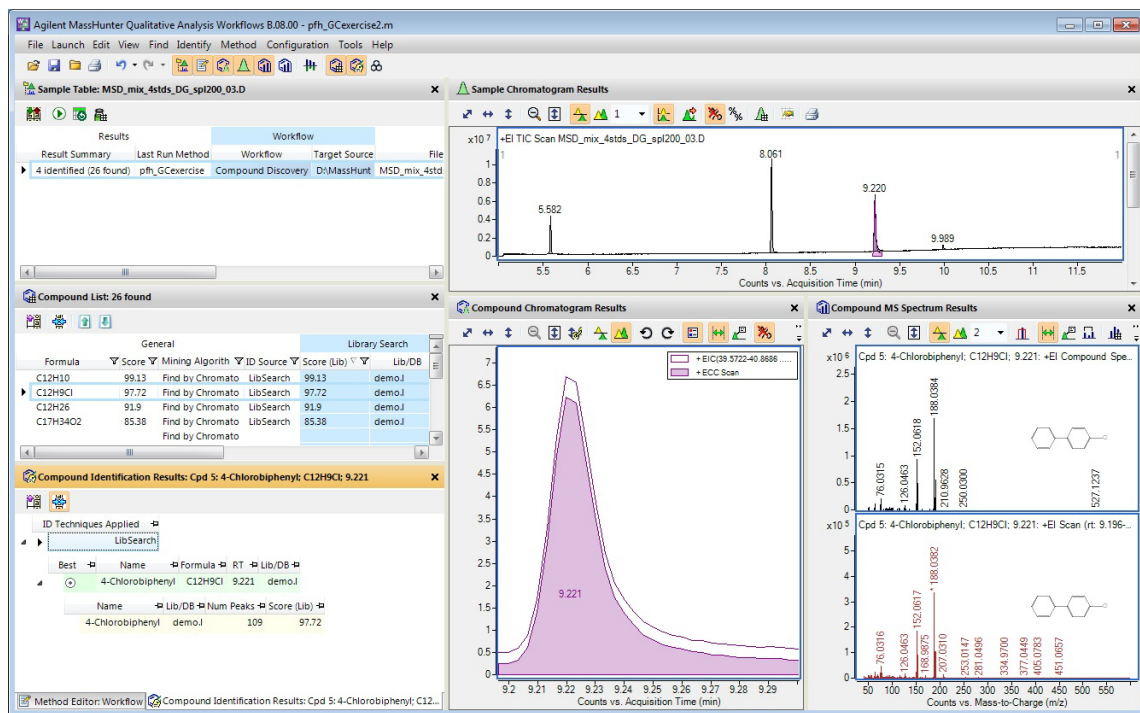


Рис. 53 Результаты рабочего процесса скрининга соединений (Compound Screening Workflow)

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)

Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Закройте файл данных без сохранения результатов.	<ul style="list-style-type: none">a Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных).b Ответьте No (Нет) на вопрос о сохранении результатов.	

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

В этом задании вы настроите метод качественного анализа, содержащий список действий анализа, которые необходимо выполнить в определенном порядке. Список действий отличается в программах Qualitative Navigator и Qualitative Workflows.

В программе Qualitative Analysis Navigator можно выполнить только пользовательский рабочий процесс (Custom Workflow). В программе Qualitative Analysis Workflows можно выполнить любой рабочий процесс, однако нельзя выполнить некоторые действия в пользовательском рабочем процессе (Custom Workflow). Изменять параметры анализа соединений можно только в программе Qualitative Workflows. В этом задании используйте программу Qualitative Analysis Navigator.

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1	<p>Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Navigator. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты) и нажмите Open (Открыть).</p>	
2	<p>Настройте пользовательский интерфейс.</p> <p>a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).</p> <p>b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).</p> <p>c Выберите Default-GCMS.m.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать


Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Добавьте действия в пользовательский рабочий процесс (Custom Workflow).	<p>a При необходимости выберите пункты View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов).</p> <p>b В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс).</p> <p>c Выберите значение Custom (Пользовательский) для параметра Workflow (Рабочий процесс). По умолчанию пользовательский рабочий процесс включает в себя извлечение дополнительных хроматограмм, интегрирование и извлечение спектров пиков, а также определение выбранных спектров.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Действия выполняются в том порядке, в котором они указаны в списке Actions to be run (Действия для выполнения). Чтобы изменить порядок элементов в списке, используйте кнопки со стрелками на вкладке параметров (Options).
4 Проверьте параметры для действия Identify Selected Spectra (Определение выбранных спектров).	<p>a Выберите раздел Identify Spectra (Определить спектры) > Identification Workflow (Рабочий процесс определения) в окне редактора методов (Method Editor).</p> <p>b Проверьте параметры.</p> <p>c Перейдите на вкладку Database Search Settings (Настройки поиска в базе данных).</p> <p>d Проверьте параметры.</p> <p>e Перейдите на вкладку Library Search Settings (Настройки поиска в библиотеке).</p> <p>f Проверьте параметры.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Обратите внимание, что голубые треугольники появляются в других разделах обозревателя методов (Method Explorer). Они означают, что те же значения параметров были изменены также где-то в другом месте.
5 Сохраните метод в <i>iii_GCexercise3</i> , где « <i>iii</i> » — ваши инициалы.	<p>a В верхнем меню выберите Method (Метод) > Save As (Сохранить как).</p> <p>b Укажите название iii_GCexercise3.</p> <p>c Нажмите кнопку Save (Сохранить).</p>	

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Протестируйте пользовательский рабочий процесс.	<p>a Выберите раздел Method Automation (Автоматизация метода) > Workflows (Рабочие процессы) в окне редактора методов (Method Editor).</p> <p>b Щелкните значок Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода)  чтобы выполнить рабочий процесс в отношении файла данных. Либо можно выбрать пункты Method (Метод) > Run Method Workflow (Выполнить рабочий процесс метода).</p>	

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Рассмотрите результаты.	<ol style="list-style-type: none">Щелкните вкладку результатов определения спектра (Spectrum Identification Results), чтобы открыть соответствующее окно. Это окно разделено на вкладки окна результатов хроматограммы (Chromatogram Results).Выберите спектр на уровне 9,2 мин.Щелкните View (Просмотр) > Difference Results (Разница результатов).Щелкните View (Просмотр) > Structure Viewer (Средство просмотра структуры).Рассмотрите результаты.	<ul style="list-style-type: none">При выполнении пользовательского рабочего процесса вы можете создать отчет, выбрав пункт Run Method Automation (Workflow + Reports) (Запустить автоматизацию метода (рабочий процесс + отчеты)).Окно результатов по разнице спектров (Spectral Difference Results) разделено на вкладки окна результатов спектров МС (MS Spectrum Results).

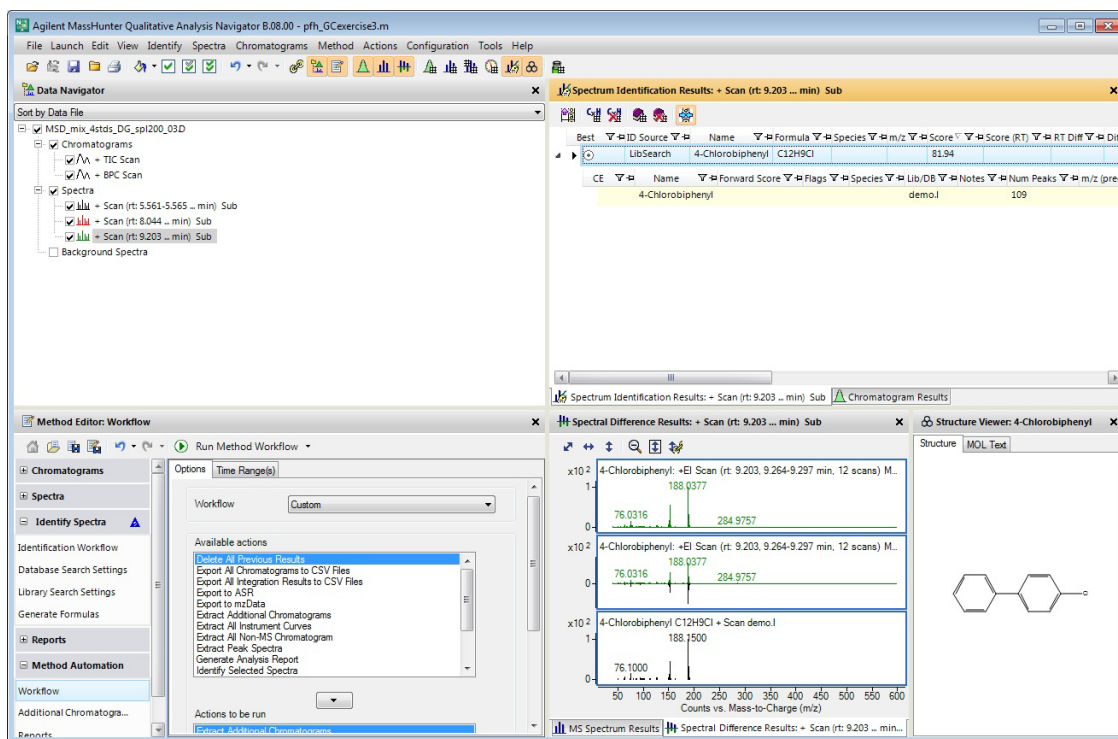


Рис. 54 Результаты пользовательского рабочего процесса в программе Qualitative Analysis Navigator

Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)**Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)**

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Закройте файл данных без сохранения результатов.	a Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных) . b Ответьте No (Нет) на вопрос о сохранении результатов.	

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Вы можете экспортировать файл CEF, который содержит информацию о соединениях. Этот файл CEF может быть импортирован в другие программы, например MassHunter Mass Profiler и Mass Profiler Professional. Экспортировать файл CEF можно только из программы MassHunter Qualitative Workflows.

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none">a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).b Щелкните MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке GCMS Pesticide (Пестициды ГХ/МС).c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты).d Выберите команду Open (Открыть).	<ul style="list-style-type: none">• Экспортировать файл CEF можно в диалоговом режиме или при выполнении процесса Method Automation (Workflow + Reports) (Автоматизация метода (рабочий процесс + отчеты)).
2 Настройте пользовательский интерфейс.	<ul style="list-style-type: none">a Выберите пункты Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию).b Щелкните Method (Метод) > Open (Открыть).c Выберите Default-GCMS.m.d Нажмите кнопку OK.	<ul style="list-style-type: none">• В приведенных примерах следует начать с метода Default-GCMS.m.
3 Найдите соединения.	<ul style="list-style-type: none">• Запустите любой алгоритм анализа соединений. Например, выберите пункты Find (Найти) > Find by Molecular Feature (Найти по молекулярной характеристике).	<ul style="list-style-type: none">• Файл CEF будет использован для экспорта соединений.

Задание 21. Экспортируйте файл CEF (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4	<p>Экспортируйте файл CEF.</p> <p>a Чтобы экспортировать файл, щелкните File (Файл) > Export (Экспортировать) > as CEF (как CEF).</p> <p>b Выберите вариант All results (Все результаты).</p> <p>c Выберите местоположение для экспортируемого файла.</p> <p>d Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Импортировать файл CEF можно в программах Mass Profiler Professional и MassHunter Mass Profiler.

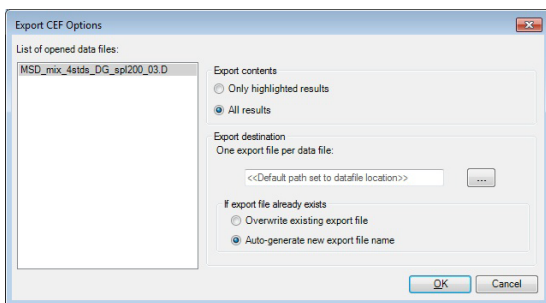


Рис. 55 Диалоговое окно Export CEF Options (Параметры экспорта CEF)

5	<p>Измените метод так, чтобы можно было экспортировать файл CEF.</p> <p>a Щелкните вкладку редактора методов (Method Editor), чтобы открыть соответствующее окно. Это окно по умолчанию разделено на вкладки окна результатов определения соединений (Compound Identification Results).</p> <p>b Выберите пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Export (Экспорт).</p> <p>c Установите флажок CEF.</p> <p>d Проверьте другие параметры в этом разделе.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Вы можете экспортировать результаты в различных форматах. Для некоторых алгоритмов можно изменить параметры экспорта (Export). При экспорте файла CEF дополнительные параметры не указываются.
---	---	---

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Задание 21. Экспортируйте файл CEF (продолжение)

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

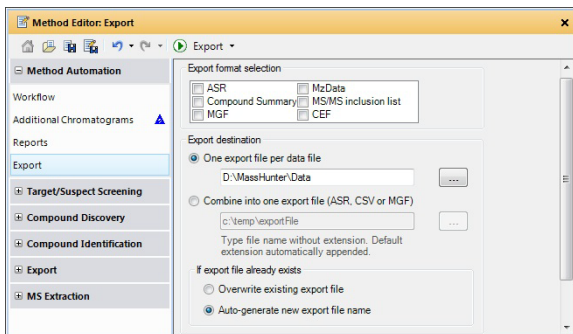


Рис. 56 Раздел Method Automation (Автоматизация метода) > Export (Экспорт) в окне редактора методов (Method Editor)

6 Запустите алгоритм Method Automation (Workflow + Reports) (Автоматизация метода (рабочий процесс + отчеты)).

- Выберите пункты **Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс)**.
- Выберите пункты **Method (Метод) > Run Method Automation (Workflow + Reports) (Запустить автоматизацию метода (рабочий процесс + отчеты))**. Либо можно щелкнуть стрелку рядом со значком запуска , чтобы выполнить рабочий процесс в отношении файла данных.

- При выборе процесса Method Automation (Workflow + Reports) (Автоматизация метода (рабочий процесс + отчеты)) выполняются следующие алгоритмы.
 - Рабочий процесс метода
 - Извлечение дополнительных хроматограмм
 - Создание отчета
 - Экспорт результатов

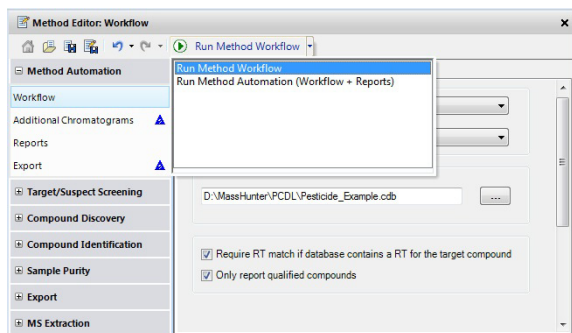


Рис. 57 Раздел Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс) с вариантами выполнения.

Задание 21. Экспортируйте файл CEF (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Сохраните метод в <i>iii_GCexercise4</i> , где « <i>iii</i> » — ваши инициалы.	<ul style="list-style-type: none">a В верхнем меню выберите Method (Метод) > Save As (Сохранить как).b Укажите название iii_GCexercise4.c Нажмите кнопку Save (Сохранить).	

Задание 22. Печать отчета об анализе

Следуйте этим инструкциям, когда вам понадобится распечатать отчет о результатах анализа в программе Qualitative Analysis Navigator.

Отчет о результатах анализа может включать результаты извлечения и интегрирования хроматограмм, извлечения спектров, поиска спектров пиков в базе данных или создания формул из спектров пиков.

Задание 22. Печать отчета об анализе

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Если файл данных MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d не загружен, откройте этот файл данных и запустите рабочий процесс для метода iii_GCexercise3.m, который был создан в пункте «Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)» на стр. 105.</p>	<p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Navigator. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты).</p> <p>d Нажмите кнопку Use current method (Использовать текущий метод) и щелкните Open (Открыть).</p> <p>e Выберите пункты Method (Метод) > Run Method Workflow (Запустить рабочий процесс метода).</p>	<ul style="list-style-type: none"> После выполнения «Задание 20. Настройка и выполнение метода с помощью пользовательского рабочего процесса (Custom workflow)» на стр. 105 текущим методом будет iii_GCexercise3.m. Этот метод предусматривает извлечение дополнительных хроматограмм, интегрирование и извлечение спектров пиков, а также определение выбранных спектров. Отчет о результатах анализа содержит сведения об интегрировании и спектрах. Если вы определили спектр, в отчет может быть включена и эта информация.
<p>2 Измените выбранные элементы для отчета о результатах анализа в методе:</p> <ul style="list-style-type: none"> Отметьте хроматограммы, спектры или таблицы, которые вы хотите распечатать. Снимите отметки с хроматограмм, спектров или таблиц, которые вы не хотите печатать. 	<p>a Выберите пункты View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов).</p> <p>b В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Reports (Отчеты) > Analysis Report (Отчет о результатах анализа).</p> <p>c Отметьте все дополнительные разделы, которые вы хотите распечатать.</p> <p>d Снимите флажки с полей, которые вы не хотите печатать.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Отчет о результатах анализа будет содержать только ту информацию, которую вы отметите в этом разделе. Либо вы можете выбрать пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Reports (Отчеты), чтобы настроить параметры отчетов. Внесенные здесь изменения отражаются в разделе отчетов (Reports) и наоборот. Если некоторые результаты недоступны, значит эти результаты не включены, даже если они отмечены в этом разделе. Например, если вы не интегрировали хроматограмму, таблица пиков не будет включена.

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

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

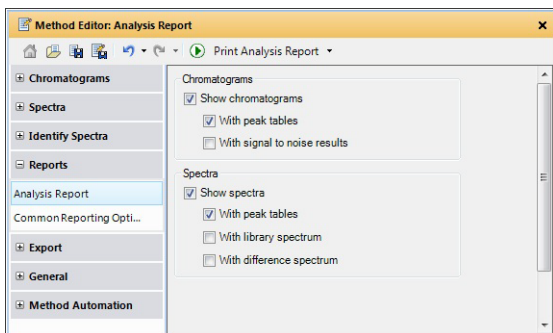
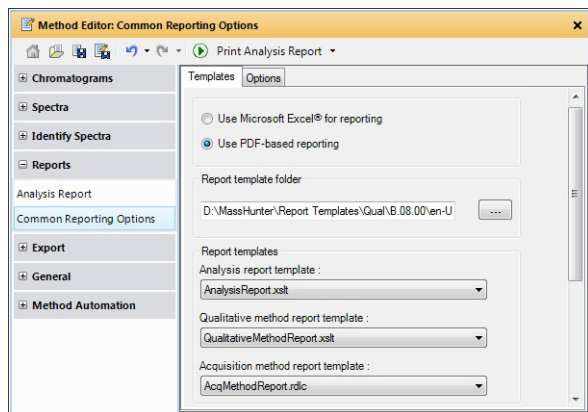


Рис. 58 Раздел Analysis Report (Отчет о результатах анализа) в окне редактора методов (Method Editor)

- | | | |
|---|--|--|
| <p>3 Проверьте параметры шаблонов (Templates).</p> | <p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Reports (Отчеты) > Common Reporting Options (Общие параметры отчетов).</p> <p>b (необязательно) Выберите другой шаблон отчета о результатах анализа.</p> | <p>• Доступны разные шаблоны отчета. Они содержат разную информацию.</p> |
|---|--|--|



Вы можете выбрать для отчетов формат Microsoft Excel либо PDF.


Если вы выберете вариант Use Microsoft Excel for reporting (Использовать Microsoft Excel для отчетов), будет предложен соответствующий набор шаблонов. Для изменения выбранного шаблона можно использовать Excel. Дополнительные сведения об изменении шаблона см. в онлайн-справке для Report Designer.

Рис. 59 Вкладка Common Reporting Options (Общие параметры отчетов) > Templates (Шаблоны) в окне редактора методов (Method Editor)

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 22. Печать отчета об анализе

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4 Распечатайте отчет.	<p>a Используйте один из указанных далее способов для печати отчета.</p> <ul style="list-style-type: none">• В главном меню выберите File (Файл) > Print (Печать) > Analysis Report (Отчет о результатах анализа).• На главной панели инструментов щелкните значок принтера (Printer).• Щелкните значок Print Analysis Report (Печатать отчет по результатам анализа)  на панели инструментов редактора методов (Method Editor) при выбранном разделе отчета о результатах анализа (Analysis Report).• В редакторе методов (Method Editor) щелкните правой кнопкой мыши раздел отчета о результатах анализа (Analysis Report) и выберите Print Analysis Report (Печатать отчет о результатах анализа).• В контекстном меню файла данных в навигаторе по данным (Data Navigator) щелкните Analysis Report (Отчет о результатах анализа). <p>b Щелкните один из вариантов под заголовком Report contents (Содержание отчета).</p> <p>c (дополнительно) Поставьте флажок в поле Separate report per data file (Разделить отчет по файлам данных).</p> <p>d Отметьте пункт Print report (Печатать отчет) и выберите принтер.</p> <p>e Отметьте пункт Print preview (Просмотр документа).</p> <p>f Нажмите кнопку OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Значок Run (Выполнить)  на панели инструментов окна редактора методов (Method Editor) иногда позволяет выбрать действие из списка возможных действий. Например, если в окне редактора методов (Method Editor) вы переключитесь в раздел Reports (Отчеты) > Common Reporting Options (Общие параметры отчетов), после нажатия кнопки Run (Выполнить) вам станут доступны четыре различных действия. Если щелкнуть стрелку, появится список действий, которые можно выбрать. Выбор нового действия из списка меняет предыдущее действие по умолчанию. Если сразу нажать кнопку Run (Выполнить), будет выполнено текущее действие по умолчанию.• Если вы выберете пункты Method (Метод) > Run Method Automation (Workflow + Reports) (Запустить автоматизацию метода (рабочий процесс + отчеты)), запустится рабочий процесс метода. После этого будут извлечены все дополнительные хроматограммы и напечатан отчет. В конце могут быть созданы файлы экспорта, если соответствующий пункт отмечен в разделе Method Automation (Автоматизация метода) > Export (Экспорт).

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

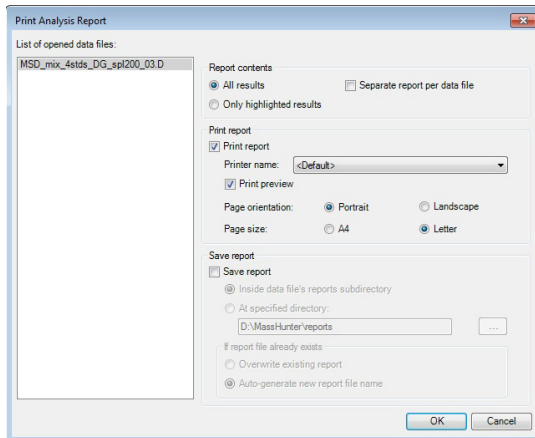


Рис. 60 Диалоговое окно Print Analysis Report (Печатать отчет о результатах анализа)

- g** Просмотрите отчет.
- h** Щелкните значок **Close Print Preview (Закреть просмотр документа)** на панели инструментов.

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 22. Печать отчета об анализе

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги

Подробные инструкции

Комментарии

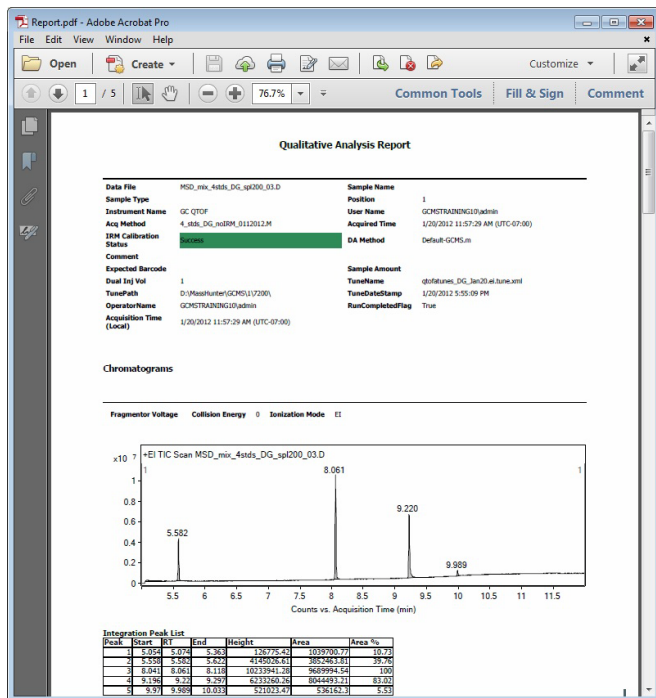


Рис. 61 Предварительный просмотр отчета о результатах анализа

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Следуйте этим инструкциям, когда вам понадобится распечатать отчет по соединениям. Отчет о соединениях печатается в программе Qualitative Workflows.

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
<p>1 Если файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d не загружен, откройте этот файл данных и запустите рабочий процесс для метода iii_GCsexercise2.m, который был создан в «Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)» на стр. 101.</p>	<p>a Если программа еще не открыта, дважды щелкните значок MassHunter Qualitative Workflows. В другом случае щелкните File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных).</p> <p>b Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d в папке образцов файлов данных ГХ.</p> <p>c Снимите отметку с пункта Load result data (Загрузить результаты).</p> <p>d Нажмите кнопку Use current method (Использовать текущий метод) и щелкните Open (Открыть).</p>	<ul style="list-style-type: none"> После выполнения «Задание 19. Настройка и выполнение метода с использованием рабочего процесса обнаружения соединений (Compound Discovery)» на стр. 101 текущим методом будет iii_GCsexercise2.m. Для этого метода используется рабочий процесс Compound Discovery (Обнаружение соединения). Автоматически выбирается алгоритм анализа соединения (Compound mining) и устанавливается флажок Identify by - Library / Database Search (Определение с помощью: поиск в библиотеках и базах данных).
<p>2 Запустите рабочий процесс.</p> <ul style="list-style-type: none"> Отчет о соединениях содержит таблицу соединений. 	<ul style="list-style-type: none"> Выберите пункты Method (Метод) > Run Method Workflow (Запустить рабочий процесс метода). 	<ul style="list-style-type: none"> Алгоритм анализа соединения (Compound mining) выбирается автоматически. В отношении соединений выполняется алгоритм поиска в библиотеке или базе данных (Library/Database search).

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
<p>3 Проверьте выбранные шаблоны.</p> <ul style="list-style-type: none">• Чтобы выбрать другой шаблон, нужно знать, какой рабочий процесс выбран и, соответственно, какой параметр шаблона отчета нужно изменить.• Если вы выберете вариант Use Microsoft Excel for reporting (Использовать Microsoft Excel для отчетов), то сможете использовать приложение Excel и встроенное дополнение Report Designer, чтобы изменить любой шаблон с расширением XLTX. Вы не можете изменить отчет метода сбора данных.	<p>a В окне редактора методов (Method Editor) выберите пункты Method Automation (Автоматизация метода) > Reports (Отчеты).</p> <p>b Перейдите на вкладку Templates (Шаблоны).</p> <p>c (необязательно) Выберите другой шаблон отчета в пункте Target screening report template (Шаблон отчета о скрининге целевого соединения).</p> <p>d (необязательно) Выберите другой шаблон отчета в пункте Compound Discovery report template (Шаблон отчета об обнаружении соединения).</p> <p>e (необязательно) Выберите другой шаблон отчета в пункте Sample purity report template (Шаблон отчета о чистоте пробы).</p> <p>f (необязательно) Выберите другой шаблон отчета в пункте Compound report template (Шаблон отчета о соединении).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Шаблон, который используется для печати отчета о соединениях, зависит от текущего рабочего процесса.• Шаблон отчета о скрининге целевого соединения (Target screening report template) используется при рабочем процессе Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений).• Шаблон отчета об обнаружении соединения (Compound Discovery report template) используется при рабочем процессе Compound Discovery (Обнаружение соединений).• Шаблон отчета о соединениях (Compound report template) используется при рабочем процессе Custom (Пользовательский).• Текущий рабочий процесс должен быть выбран в разделе Method Automation (Автоматизация метода) > Workflow (Рабочий процесс).

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4	<p>Измените некоторые выбранные элементы в методе для отчетов по соединениям:</p> <ul style="list-style-type: none"> Выключите просмотр спектров МС, приближенных на определенных пиках. Выключите параметры МС/МС в отчете. <p>a Перейдите на вкладку Contents (Содержимое).</p> <p>b Снимите флажок Show MS spectrum (zoomed in on special peaks) (Показать спектр МС (с увеличением масштаба на особых пиках)).</p> <p>c Если показан флажок Show MS/MS spectrum (Показать спектр МС-МС), снимите его.</p> <p>d Если показан флажок Show MS/MS peak table (Показать таблицу пиков МС-МС), снимите его.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Эти пункты позволяют вам указывать информацию, которую необходимо включить в отчет, если она доступна. Если информация недоступна, этот раздел будет автоматически пропущен. Например, результаты МС/МС не будут включены, если файл данных содержит только данные МС. Раздел Compound spectrum (MS/MS) (Спектр соединения (МС-МС)) не показан, если открытые файлы данных содержат только данные МС. Если есть данные ГХ/МС, снимите флажок Overlay compound chromatograms (Наложение хроматограмм соединения).

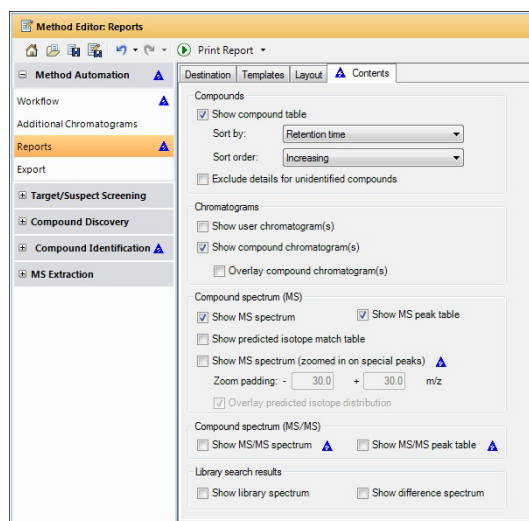
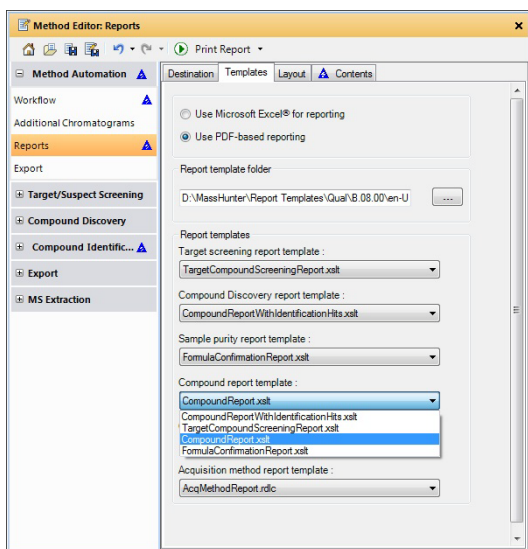


Рис. 62 Раздел Compound Report (Отчет по соединениям) в редакторе методов (Method Editor)

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
6 Закройте файл данных без сохранения результатов.	<ul style="list-style-type: none">a Нажмите File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных).b Ответьте No (Нет) на вопрос о сохранении результатов.	

3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 23. Печать отчета по соединениям



Справка

Программа Qualitative Analysis Navigator	126
Основные функциональные области	126
Окна в программе Qualitative Analysis Navigator	131
Программа Qualitative Analysis Workflows	143
Основные функциональные области	143
Окна в программе Qualitative Analysis Workflows	147
Программы Qualitative Analysis Navigator и Workflows	165
Компоновка	165
Настройка шаблона отчета	167



Программа Qualitative Analysis Navigator

Основные функциональные области

Когда вы впервые открываете программу Программа качественного анализа Navigator, на экране появляются три области: (1) панель меню, (2) панель инструментов и (3) главное окно. Основные функциональные области показаны на Рис. 64.

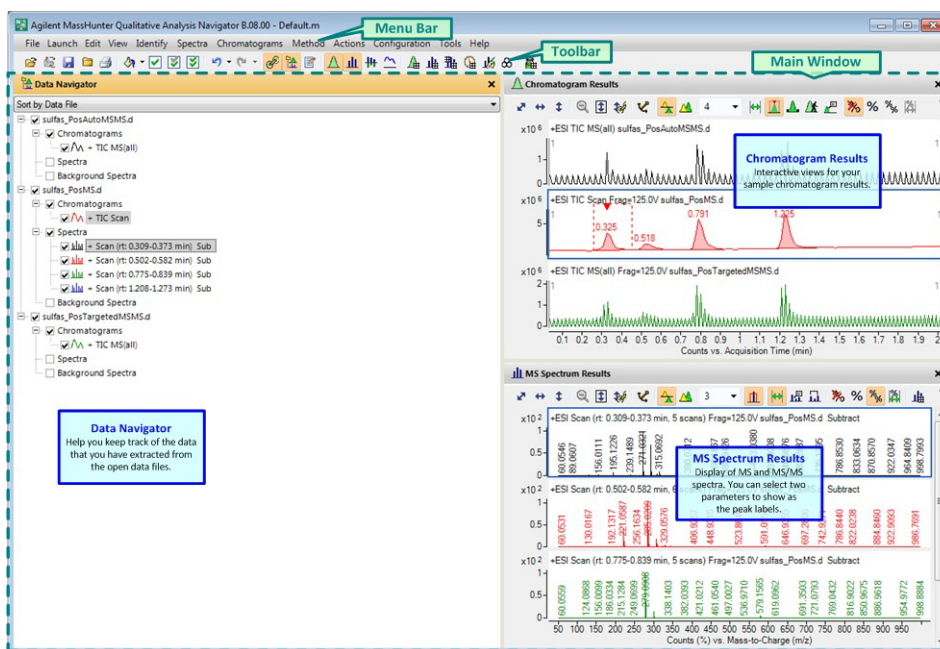
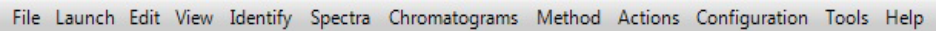


Рис. 64 Обзор программы Qualitative Analysis Navigator

1. Панель меню

На панели меню (Рис. 65) представлены действия, используемые для извлечения хроматограмм и спектров, определения спектров, печати и экспорта отчетов, а также запуска программы Qualitative Analysis Workflows или BioConfirm. Все меню описаны в онлайн-справке.



File Launch Edit View Identify Spectra Chromatograms Method Actions Configuration Tools Help

Рис. 65 Панель меню программы Qualitative Analysis Navigator

2. Панель инструментов

На панели инструментов представлены действия, с помощью которых можно открывать и закрывать файлы данных. Здесь также можно открывать и сохранять методы, печатать отчеты о соединениях, отображать и скрывать окна.

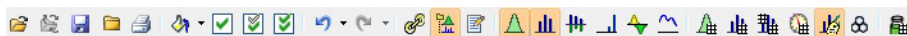

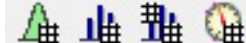



Рис. 66 Панель инструментов программы Qualitative Analysis Navigator

Значок панели инструментов	Действие
	File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных) File (Файл) > Refresh Data File (Обновить файл данных) File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты) File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных) File (Файл) > Print (Печать) > Analysis Report (Отчет о результатах анализа) Edit (Изменить) > Choose Defined Color (Выбрать заданный цвет)
	Edit (Изменить) > Show (Показать) > Highlighted (Выделенные) Edit (Изменить) > Show (Показать) > Only Highlighted (Только выделенные) Edit (Изменить) > Show (Показать) > All Items (Все элементы) Edit (Изменить) > Undo (Отменить) Edit (Изменить) > Redo (Повторить)
	View (Просмотр) > Linked Navigation (Связанная навигация) View (Просмотр) > Data Navigator (Навигатор по данным) View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов)

Основные функциональные области

Значок панели инструментов	Действие
	<p>Окно Chromatogram Results (Результаты для хроматограмм) Окно MS Spectrum Results (Результаты спектра МС) Окно Difference Results (Результаты по разнице) Окно UV Spectrum Results (Результаты УФ спектра)</p>
	<p>Окно Integration Peak List (Список пиков интегрирования) Окно MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 пиков спектра МС) Окно MS Spectrum Peak List 2 (Список 2 пиков спектра МС) Окно MS Actuals (Фактические данные МС)</p>
	<p>Окно Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров) Окно Structure Viewer (Средство просмотра структуры) Окно Sample Information (Сведения о пробе)</p>

3. Главное окно

Главное окно (см. Рис. 64 на стр. 126) может включать в себя до 17 меньших окон:

- Data Navigator (Навигатор по данным)
- Method Editor (Редактор методов)
- Chromatogram Results (Результаты хроматограммы)
- Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров)
- MS Spectrum Results (Результаты спектров МС)
- Recalibration (Повторная калибровка)
- Difference Results (Разница результатов)
- UV Spectrum Results (Результаты спектров УФ)
- Integration Peak List (Список пиков интегрирования)
- MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 пиков спектра МС)
- MS Spectrum Peak List 2 (Список 2 пиков спектра МС)
- MS Actuals (Фактические данные МС)
- Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)
- Structure Viewer (Средство просмотра структуры)
- Sample Information (Информация о пробах)
- Formula Calculator (Калькулятор формул)
- Mass Calculator (Калькулятор масс)

Два окна из этого списка (Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров) и Recalibration (Повторная калибровка)) запускаются из других окон списка, и еще два окна (Formula Calculator (Калькулятор формул) и Mass Calculator (Калькулятор масс)) запускаются из меню инструментов. При первом открытии программы Программа качественного анализа Navigator вы увидите три окна с компоновкой по умолчанию: Data Navigator (Навигатор по данным), Chromatogram Results (Результаты хроматограммы) и MS Spectrum Results (Результаты спектров МС).

Окна в программе Qualitative Analysis Navigator

Data Navigator (Навигатор по данным) Data Navigator (Навигатор по данным) упорядочивает все результаты извлечения и выбора спектров по файлам данных или типам данных. При сортировке по файлам данных все извлеченные хроматограммы указаны в пункте Chromatograms (Хроматограммы) для каждого файла данных. Все извлеченные спектры указаны либо в пункте Spectra (Спектры), либо в пункте Background Spectra (Фоновые спектры).

Если щелкнуть хроматограмму или спектр, график автоматически будет подсвечен в соответствующем окне, а окна с таблицами будут обновлены. Когда активен параметр Linked Navigation (Связанная навигация) (**View (Просмотр) > Linked Navigation (Связанная навигация)**), активируется дополнительная привязка хроматограммы к извлеченным из нее спектрам (и наоборот). При выделении хроматограммы в Data Navigator (Навигатор по данным) также выделяются соответствующие спектры. А также выделяются соответствующие хроматограмма и графические результаты спектра. Linked Navigation (Связанная навигация) работает только при использовании команды **Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрирование и извлечение спектров пиков)** в меню Chromatograms (Хроматограммы).

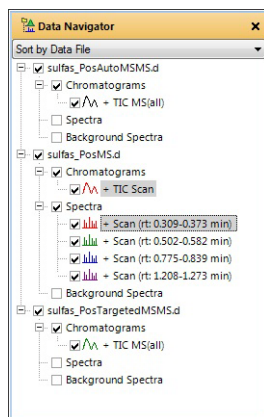


Рис. 67 Окно навигатора по данным (Data Navigator) с тремя открытыми файлами данных

Method Editor (Редактор методов) В этом окне можно изменить параметры метода. Эти параметры разделены между несколькими вкладками, и связанные вкладки сгруппированы в разных разделах. В левой части окна показаны различные разделы. Если нажать клавишу **F1**, появится справка для вкладки, которая в данный момент открыта в текущем разделе.

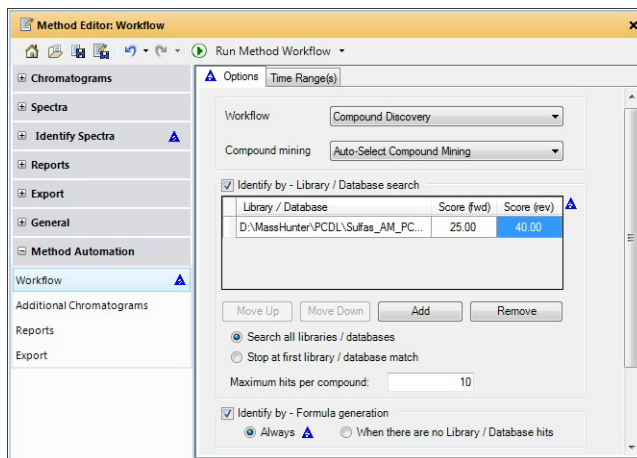


Рис. 68 Окно Method Editor (Редактор методов)

Chromatogram Results (Результаты хроматограммы) В этом окне можно просмотреть любую хроматограмму. Можно также просмотреть одновременно несколько хроматограмм из разных файлов. Хроматограммы можно отобразить с наложением или в виде списка. Рис. 69 иллюстрирует отображение хроматограмм в виде списка.

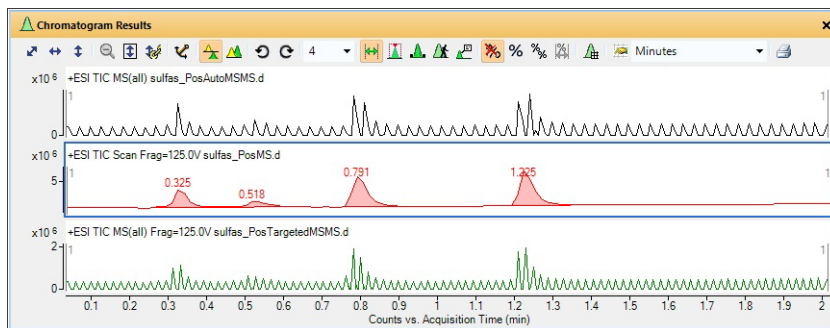


Рис. 69 Окно результатов хроматограмм (Chromatogram Results) с тремя хроматограммами, расположенными в виде списка

Выполнение операций на хроматограмме

С хроматограммами можно выполнить множество разных действий.

- Можно изменить внешний вид графиков в окне с помощью значков на панели инструментов Chromatogram Results (Результаты хроматограммы).
- Можно извлечь дополнительные хроматограммы или масс-спектры либо обработать хроматограммы с помощью меню **Chromatograms (Хроматограммы)**.
- Можно запустить различные операции с помощью контекстного меню. Если щелкнуть хроматограмму правой кнопкой мыши в окне результатов хроматограммы (Chromatogram Results), появится контекстное меню.

Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).
В таблице ниже указаны некоторые возможные операции.

Действие	Способ выполнения
Изменение маркировки пиков на хроматограмме	Щелкните  на панели инструментов Chromatogram Results (Результаты хроматограммы)
Извлечение хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)
Извлечение дополнительных хроматограмм	Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Additional Chromatograms (Извлечь дополнительные хроматограммы)
Интегрирование хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)
Интегрирование и извлечение спектров пиков	Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)
Сглаживание хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Smooth Chromatogram (Сгладить хроматограмму)
Вычисление соотношения «сигнал-шум»	Chromatograms (Хроматограммы) > Calculate Signal-to-Noise (Вычислить соотношение «сигнал-шум»)

Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров) В этом окне можно быстро проверить спектры в файле данных. Оно запускается из окна результатов хроматограмм (Chromatogram Results) при выборе инструмента просмотра хроматограммы (Walk Chromatogram) (📄). Показанные в этом окне спектры не сохраняются в окне навигатора по данным (Data Navigator), если вы не скопируете их в раздел Spectra (Спектры).

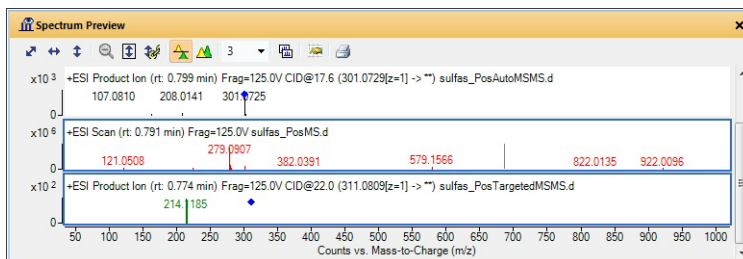


Рис. 70 В окне предварительного просмотра спектров (Spectrum Preview) показаны спектры из 3 файлов данных

MS Spectrum Results (Результаты спектров MS) В этом окне отображаются спектры MS и MS-MS. К ним можно добавить примечания и циркули. В диалоговом окне **MS and MS/MS Spectra Display Options (Параметры отображения спектров MS и MS-MS)** можно изменить надписи пиков и шрифт. Если вы выполнили поиск в библиотеке и определили спектр, в области этого спектра может быть показана структура. Также можно увидеть предполагаемые распределения изотопов (с помощью создания формулы) и пользовательские примечания в виде текста и графики, включая циркули для измерения разниц массы.

Со спектрами можно выполнить множество разных действий.

- Можно изменить внешний вид графиков в окне с помощью значков на панели инструментов MS Spectrum Results (Результаты спектров MS). Также можно добавить примечания и циркули с помощью панели инструментов.
- Вы можете добавить или вычесть спектр, отправить спектр в персональную библиотеку точных масс (PCDL), повторно откалибровать спектр с помощью меню **Spectra** (Спектры).
- Можно запустить различные операции с помощью контекстного меню. Если щелкнуть спектр правой кнопкой мыши в окне результатов спектров MS (MS Spectrum Results), появится контекстное меню.

Дополнительные сведения о панелях инструментов и меню, в том числе контекстных, см. в онлайн-справке.

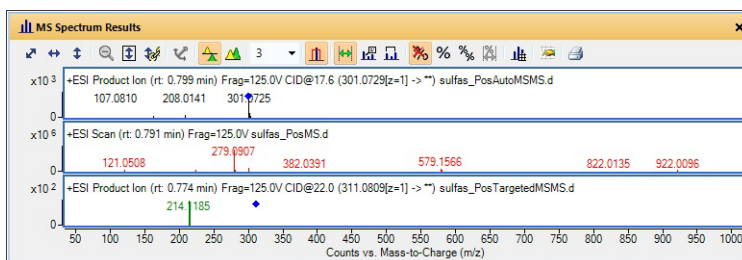


Рис. 71 В окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results) показаны три спектра МС

Recalibration (Повторная калибровка) В этом окне можно уточнить калибровку массы для данных TOF или Q-TOF. Укажите список эталонных масс, и система найдет соответствия для них в спектре, для которого вы запустили данное окно. Эти значения можно применить к файлу данных. Окно запускается из контекстного меню в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results).

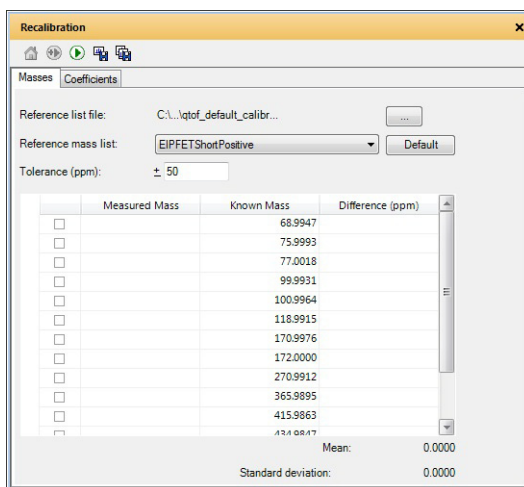


Рис. 72 Окно повторной калибровки (Recalibrate)

Spectral Difference Results (Результаты по разнице спектров) После того как вы выполнили алгоритм поиска в библиотеке (Search Library) и с его помощью определили спектр, в этом окне появляются три спектра. Первый – спектр, который вы искали. Второй – спектр разницы. Для его получения библиотечный спектр вычитается из спектра пользователя. Третий – библиотечный спектр, который в данный момент выбран в окне результатов определения спектра (Spectrum Identification Results).

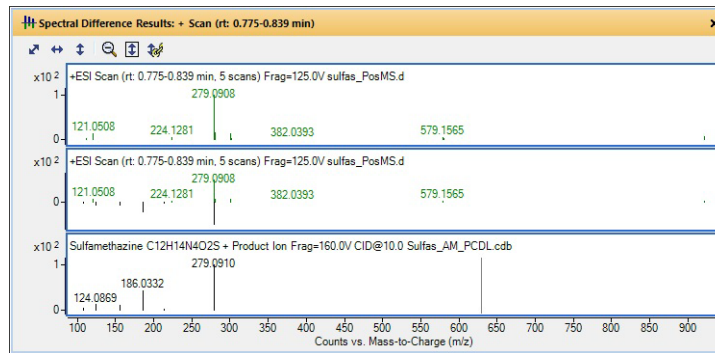


Рис. 73 Окно Spectral Difference Results (Результаты по разнице спектров)

UV Spectrum Results (Результаты спектров УФ) В этом окне показаны УФ спектры. УФ спектр можно вычистить из хроматограммы МС или УФ хроматограммы, если вы собрали данные УФ. К УФ спектру можно добавлять примечания.

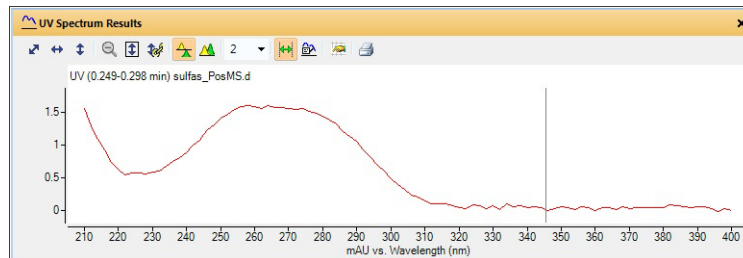


Рис. 74 UV Spectrum Results (Результаты спектров УФ)

Integration Peak List (Список пиков интегрирования) В этом окне показана таблица результатов интегрирования для выбранной хроматограммы. Каждый пик хроматограммы указан в отдельной строке таблицы. Если выделено больше одной хроматограммы, в таблице Integration Peak List (Список пиков интегрирования) показана первая выделенная хроматограмма в окне навигатора по данным (Data Navigator). С помощью команд контекстного меню можно сортировать содержимое таблицы и выбирать столбцы для отображения. Столбцы можно также перетаскивать в другое место в таблице. Контекстные меню заголовков столбцов и других ячеек отличаются.

Peak	RT	Area	Area %	Height	Max Y	Base Peak	Width	Symmetry	FWHM
1	0.325	6620637.37	48.22	2518629.43	3714626.75	271.0316	0.193	1.93	0.037
2	0.518	2989417.09	21.77	805897.31	2046221.12	285.0203	0.171	2.92	0.058
3	0.791	12361740.51	90.03	4415680.64	5718803.5	279.0899	0.166	2.14	0.041
4	1.225	13731361.99	100	5097321.16	6556291	311.0796	0.244	2.31	0.038

Рис. 75 Окно Integration Peak List (Список пиков интегрирования)

MS Spectrum Peak List 1 (Список пиков спектра МС 1) и MS Spectrum Peak List 2 (Список пиков спектра МС 2) В этой таблице показаны пики, входящие в спектр. Каждая точка спектра указана в отдельной строке таблицы. Если выделено больше одного спектра, то первый спектр будет показан в данной таблице, а второй – в окне MS Spectrum Peak List 2 (Список пиков спектра МС 2). С помощью команд контекстного меню можно сортировать содержимое таблицы и выбирать столбцы для отображения. Столбцы можно также перетаскивать в другое место в таблице. Контекстные меню заголовков столбцов и других ячеек отличаются.

m/z	Abund	Max Abund	Z	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
279.0908	1633490.62	1633490.62	1	(M+H)+	[[C12 H14 N4 O2 S]+H]+	Sulfamethazine	0.88
301.0732	233028.03	233028.03	1	(M+Na)+	[[C12 H14 N4 O2 S]+Na]+	Sulfamethazine	-0.67
64.0164	5103.09	5103.09					
102.127	4332.73	4332.73	1	(M+H)+	[[C6 H15 N]+H]+		7.39
103.9557	4402.08	4402.08					
111.0917	25555.48	25555.48		(M+H)+	[[C6 H10 N2]+H]+		0.07
112.0844	3044.42	3044.42					
113.1074	12734.43	12734.43	1	(M+H)+	[[C6 H12 N2]+H]+		-0.78
118.0865	10598.28	10598.28	1	(M+H)+	[[C5 H11 N O2]+H]+		-2.49

Рис. 76 Окно MS Peaks One (Пики МС 1)

Окна в программе Qualitative Analysis Navigator

m/z	Abund	Max Abund	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
311.0808	1446947.88	1446947.88	1	(M+H) ⁺ [(C12 H14 N4 O4 S) ⁺ H] ⁺	Sulfadimethoxine	0.19
333.0631	518946.81	518946.81	1	(M+Na) ⁻ [(C12 H14 N4 O4 S) ⁻ Na] ⁻	Sulfadimethoxine	-1
64.0163	7478.46	7478.46				
102.1272	4186.65	4186.65	1	(M+H) ⁺ [(C6 H15 N) ⁺ H] ⁺		5.59
103.9557	7038.45	7038.45				
105.9539	3094.65	3094.65				
111.0917	28786.58	28786.58	1	(M+H) ⁺ [(C6 H10 N2) ⁺ H] ⁺		-0.08
112.0857	2982.13	2982.13	1	(M+H) ⁺ [(C6 H10 N2) ⁺ H] ⁺		77.93
113.1072	15174.63	15174.63	1	(M+H) ⁺ [(C6 H12 N2) ⁺ H] ⁺		1.42

Рис. 77 Окно MS Peaks Two (Пики МС 2)

MS Actuals (Фактические данные МС) В этом окне показана информация о сборе данных для выделенного спектра. Если закрыть окно MS Actuals (Фактические данные МС), производительность улучшится. Эта таблица включает только четыре столбца: **Category (Категория)**, **Name (Имя)**, **Value (Значение)** и **Unit (Единица)**.

Category	Name	Value	Unit
Source	Fragmentor2	125	Volts
Source	Fragmentor3	125	Volts
Source	Fragmentor4	125	Volts
Source	Gas Temp	350	C
Source	Ion Polarity	0	0=Positive,1=Negative
Source	LC Stream	1	0=Waste,1=MS
Source	Nebulizer	35	psig
Source	Oct 1 RF Vpp:1	750	Volts
Source	Oct 1 RF Vpp:2	750	Volts

Рис. 78 Окно MS Actuals (Фактические данные МС) с параметрами прибора для текущего спектра

Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров) В этом окне показаны результаты алгоритмов определения, примененных к спектру. Если вы выполнили алгоритм Generate Formulas (MFG) (Создать формулы (MFG)) или Search Library/DB (Поиск в библиотеке/базе данных), их результаты будут показаны здесь. В этом окне отображаются результаты только для одного спектра. Если вы выделяете другой спектр, в окне появляются результаты нового спектра, а предыдущие не отображаются. В данной таблице предусмотрены три уровня. На первом уровне показаны общие результаты для спектра. На втором уровне показаны отдельные результаты, с помощью которых был получен общий результат для алгоритма.

На третьем уровне показаны значения высоты и m/z (вычисленные и фактические). Этот уровень можно использовать для алгоритмов создания формул (Generate Formulas) и поиска в базе данных (Search Database).

Best	ID Source	Name	Formula	Species	m/z	Score	Score (DB)	Score (MFG)
1	DBSearch-LibSearch-MFG	Sulfamethazine	C12 H14 N4 O2 S	(M+Na)+ (M+H)+	301.0732	279.0908	85.98	99.56
Species								
(M+Na)+	301.0732	99.03		99.73		99.56	99.58	99.85
								233028
Height (Calc)								
231190.4	82.3			100	301.073	-0.2	233028	100
								83
								301.0732
								-0.71
								302.0756
								-0.22
								303.0711
								-0.18
Species								
(M+H)+	279.0908	99.08		99.82		99.25	99.21	98.3
CE								
10	Sulfamethazine	30.81		(M+H)+	DiMassHunter/PCDL/Sulfas_AM_PCDLcob	6	279.091	58.8

Рис. 79 Окно Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)

Structure Viewer (Средство просмотра структуры) Структуры могут привязываться к спектру при выполнении алгоритма поиска в библиотеке/базе данных (Search Library/DB), если база данных или библиотека содержит структуру для наилучшего совпадения. Структура также может привязываться, когда вы добавляете или изменяете выполненное вручную определение спектра. В средстве просмотра структуры (Structure Viewer) есть две вкладки. На вкладке Structure (Структура) представлена структура в графическом виде. На вкладке MOL Text (Текст MOL) показано текстовое описание структуры.

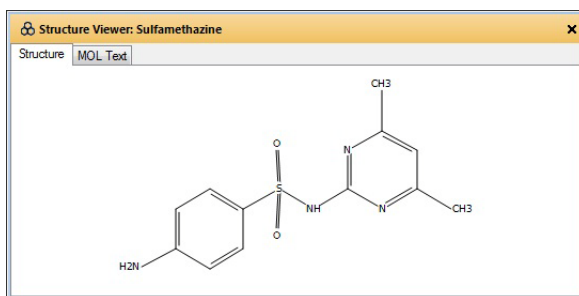


Рис. 80 Окно Structure Viewer (Средство просмотра структуры)

Formula Calculator (Калькулятор формул) Этот инструмент вычисляет возможные эмпирические формулы в соответствии со значением массы или отношения массы к заряду, которые вы указываете. Результаты можно просмотреть в диалоговом режиме, а также распечатать или экспортировать.

Element	Minimum	Maximum
C	3	60
H	0	120
O	0	30
N	0	30
S	0	5
Cl	0	3
[13C]	0	1

Formula (M)	Score (MFG)	Mass	Mass (MFG)	m/z (Calc)	Diff
C12 H14 N4 O2 S	100	278.0837	278.0837	279.091	
C6 [13C] H18 Cl N2 O7	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C5 [13C] H12 Cl N9 O2	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C10 [13C] H19 N O3 S2	99.73	278.0837	278.084	279.0913	
C13 H20 Cl2 O2	99.64	278.0837	278.084	279.0913	
C16 [13C] H13 N2 S	99.33	278.0837	278.0833	279.0906	
C12 H22 O S3	99.26	278.0837	278.0833	279.0906	
C9 H17 Cl N5 O S	99.03	278.0837	278.0842	279.0915	
C9 [13C] H15 N O8	98.65	278.0837	278.0831	279.0904	
C8 [13C] H9 N8 O3	98.63	278.0837	278.0831	279.0904	
C20 H10 N2	98.32	278.0837	278.0844	279.0917	
C10 [13C] H11 N5 O4	98.01	278.0837	278.0845	279.0917	
C7 H15 Cl N8 S	97.46	278.0837	278.0829	279.0902	
C11 H18 Cl2 N3 O	96.16	278.0837	278.0827	279.09	
C8 [13C] H17 N4 O2 S2	95.83	278.0837	278.0826	279.0899	
C7 [13C] H14 Cl N6 O3	94.7	278.0837	278.0849	279.0922	
C11 H18 O6 S	93.92	278.0837	278.0824	279.0897	

Рис. 81 Окно Formula Calculator (Калькулятор формул)

Mass Calculator (Калькулятор масс) Этот инструмент используется для ввода основной формулы и перечня типов ионов (положительные или отрицательные). Когда вы выполняете алгоритм Mass Calculator (Калькулятор масс), в соответствующей таблице для каждого типа иона в отдельной строке вычисляется масса.

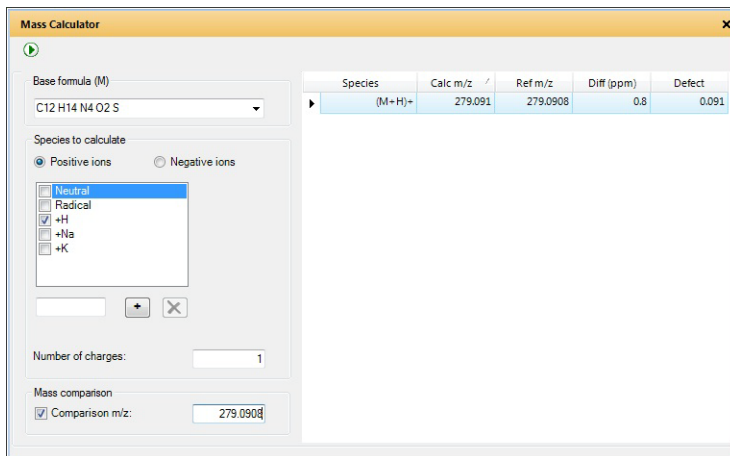


Рис. 82 Окно Mass Calculator (Калькулятор масс)

Программа Qualitative Analysis Workflows

Основные функциональные области

Когда вы впервые открываете программу Программа качественного анализа Workflows, на экране появляются три области: (1) панель меню, (2) панель инструментов и (3) главное окно. Основные функциональные области показаны на Рис. 83.

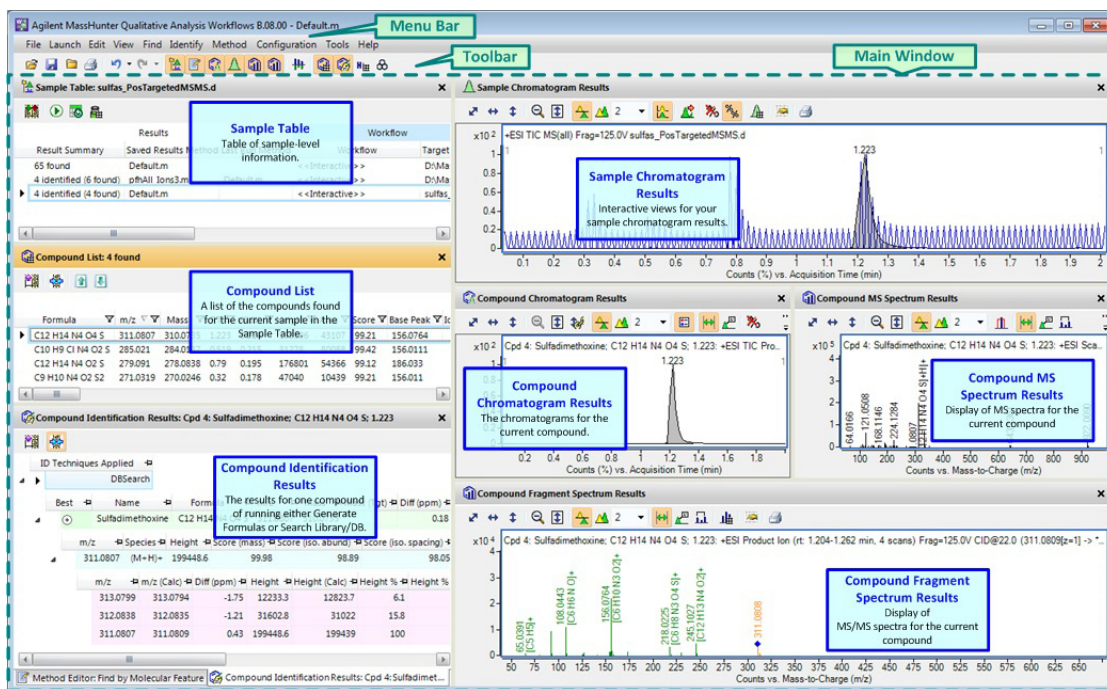


Рис. 83 Обзор программы Qualitative Analysis Workflows

1. Панель меню

На панели меню (Рис. 84) представлены действия, используемые для поиска и определения соединений, печати и экспорта отчетов, а также запуска программы Qualitative Analysis Navigator. Все меню подробно описаны в онлайн-справке.

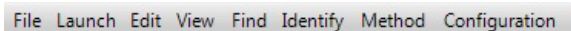


Рис. 84 Панель меню программы Qualitative Analysis Workflows

2. Панель инструментов

На панели инструментов представлены действия, с помощью которых можно открывать и закрывать файлы данных. Здесь также можно открывать и сохранять методы, печатать отчеты о соединениях, отображать и скрывать окна.

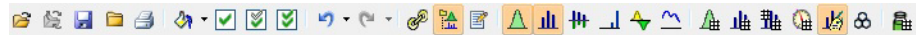



Рис. 85 Панель инструментов программы Qualitative Analysis Workflows

Значок панели инструментов	Действие
	File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных) File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты) File (Файл) > Close Data File (Закреть файл данных) File (Файл) > Print (Печать) > Compound Report (Отчет о соединениях) Edit (Изменить) > Undo (Отменить) Edit (Изменить) > Redo (Повторить)
	View (Просмотр) > Sample Table (Таблица проб) View (Просмотр) > Method Editor (Редактор методов)
	View (Просмотр) > Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения) View (Просмотр) > Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы) View (Просмотр) > Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения) View (Просмотр) > Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения) View (Просмотр) > Difference Results (Результаты по разнице)

Значок панели инструментов	Действие
	View (Просмотр) > Compound List (Список соединений) View (Просмотр) > Compound Identification Results (Результаты определения соединений) View (Просмотр) > MS/MS Formula Details (Сведения о формулах МС-МС) View (Просмотр) > Structure Viewer (Средство просмотра структуры)

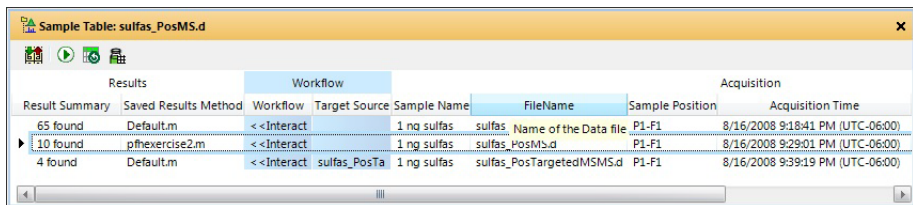
3. Главное окно

Главное окно (см. Рис. 83 на стр. 143) может включать в себя до 13 меньших окон. При первом открытии программы Программа качественного анализа Workflows вы увидите подгруппу окон с компоновкой по умолчанию:

- Таблица проб
- Compound List (Список соединений)
- Compound Identification Results (Результаты определения соединений)
- Method Editor (Редактор методов)
- Structure Viewer (Средство просмотра структуры)
- Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы)
- Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения)
- Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения)
- Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения)
- Difference Results (Разница результатов)
- MS/MS Formula Details (Сведения о формулах МС/МС)
- Formula Calculator (Калькулятор формул)
- Mass Calculator (Калькулятор масс)

Окна в программе Qualitative Analysis Workflows

Таблица проб В таблице проб показаны сведения для каждой пробы (файл данных), которая в данный момент открыта. Данные, касающиеся пробы или проб, которые вы выбираете в этом окне, отображаются в других окнах. Выбранную пробу можно повторно обработать.



Results		Workflow			Acquisition		
Result Summary	Saved Results Method	Workflow	Target Source	Sample Name	FileName	Sample Position	Acquisition Time
65 found	Default.m	<<-Interact	1 ng sulfas	sulfas	Name of the Data file	P1-F1	8/16/2008 9:18:41 PM (UTC-06:00)
▶ 10 found	pHexercise2.m	<<-Interact	1 ng sulfas	sulfas	sulfas_PosMS.d	P1-F1	8/16/2008 9:29:01 PM (UTC-06:00)
4 found	Default.m	<<-Interact	sulfas_PosTa	1 ng sulfas	sulfas_PosTargetedMSMS.d	P1-F1	8/16/2008 9:39:19 PM (UTC-06:00)




Рис. 86 Таблица проб

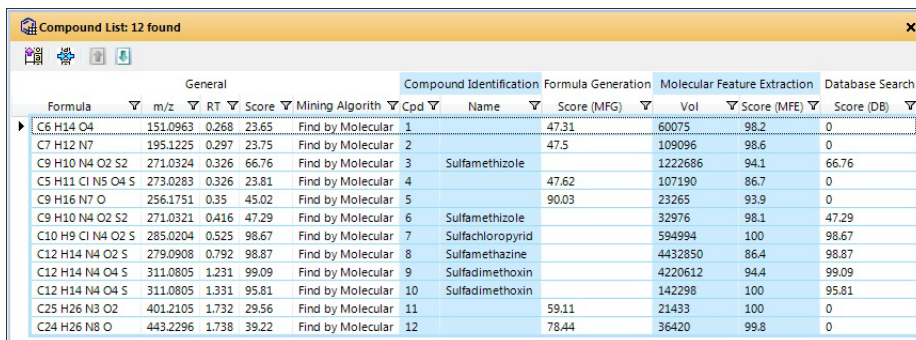
Compound List (Список соединений) В этом окне показаны все соединения, найденные для выбранных файлов проб. Можно добавлять и удалять столбцы в таблице, а также изменять порядок столбцов в категории.

Столбцы в окне списка соединений (Compound List) разделены по категориям. Вы можете менять порядок столбцов в каждой категории. Эти столбцы также отображаются в диалоговом окне **Add/Remove Columns (Добавить/удалить столбцы)**. Доступные категории:

- General (Общие)
- Compound Identification (Определение соединений)
- Formula Generation (Создание формулы)
- Molecular Feature Extraction (Извлечение молекулярной характеристики)
- Database Search (Поиск в базе данных)
- Library Search (Поиск в библиотеке)
- Sample Purity (Чистота пробы)
- Target/Suspect Screening (Скрининг целевых/предполагаемых соединений)

Панель инструментов Compound List (Список соединений)

Значок панели инструментов	Действие
	<ul style="list-style-type: none"> Скрываются все пустые в данный момент столбцы
	<ul style="list-style-type: none"> Включается и выключается автоматическое изменение размера всех столбцов. Когда эта функция включена, ширина столбцов автоматически изменяется так, чтобы была видна информация в этом столбце.
	<ul style="list-style-type: none"> Переход к предыдущему соединению. Если в данный момент выбрано первое соединение, этот значок неактивен. Переход к следующему соединению. Если в данный момент выбрано последнее соединение, этот значок неактивен.



Compound List: 12 found											
General					Compound Identification		Formula Generation		Molecular Feature Extraction		Database Search
Formula	m/z	RT	Score	Mining Algorithm	Cpd	Name	Score (MFG)	Vol	Score (MFE)	Score (DB)	
C6 H14 O4	151.0963	0.268	23.65	Find by Molecular	1		47.31	60075	98.2	0	
C7 H12 N7	195.1225	0.297	23.75	Find by Molecular	2		47.5	109096	98.6	0	
C9 H10 N4 O2 S2	271.0324	0.326	66.76	Find by Molecular	3	Sulfamethizole		1222686	94.1	66.76	
C5 H11 Cl N5 O4 S	273.0283	0.326	23.81	Find by Molecular	4		47.62	107190	86.7	0	
C9 H16 N7 O	256.1751	0.35	45.02	Find by Molecular	5		90.03	23265	93.9	0	
C9 H10 N4 O2 S2	271.0321	0.416	47.29	Find by Molecular	6	Sulfamethizole		32976	98.1	47.29	
C10 H9 Cl N4 O2 S	285.0204	0.525	98.67	Find by Molecular	7	Sulfachloropyrid		594994	100	98.67	
C12 H14 N4 O2 S	279.0908	0.792	98.87	Find by Molecular	8	Sulfamethazine		4432850	86.4	98.87	
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.231	99.09	Find by Molecular	9	Sulfadimethoxin		4220612	94.4	99.09	
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.331	95.81	Find by Molecular	10	Sulfadimethoxin		142298	100	95.81	
C25 H26 N3 O2	401.2105	1.732	29.56	Find by Molecular	11		59.11	21433	100	0	
C24 H26 N8 O	443.2296	1.738	39.22	Find by Molecular	12		78.44	36420	99.8	0	

Рис. 87 Окно списка соединений (Compound List), в котором показаны столбцы в пяти категориях

Method Editor (Редактор методов) Метод — это набор параметров, связанных с различными алгоритмами, которые могут выполняться. Методы с такими параметрами можно сохранять, используя уникальные имена файлов.

Раздел метода, который нужно отобразить, выбирается в левой области экрана. В правой области показан либо один раздел, либо несколько вкладок. Чтобы получить справочные сведения о выбранной вкладке или разделе в редакторе методов (Method Editor), нажмите **F1**.

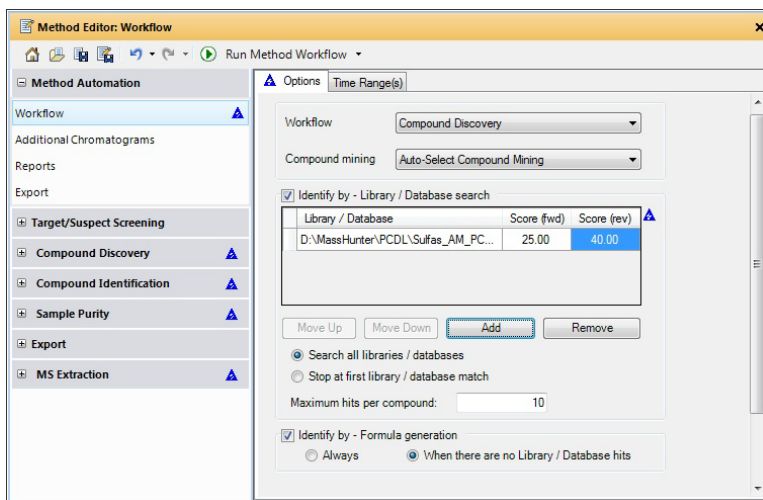


Рис. 88 Окно Method Editor (Редактор методов)

Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения)

В этом окне показаны хроматограммы, связанные с соединением (или соединениями), выбранным в окне списка соединений (Compound List), включая ионную хроматограмму (EIC). В правом верхнем углу графика можно показать условные обозначения, выбрав режим наложения (Overlaid) для хроматограмм. К графику можно добавлять примечания. Можно также экспортировать и напечатать график.

Выполнение операций на хроматограмме

С хроматограммами можно выполнить множество разных действий.

- Можно изменить внешний вид графиков в окне с помощью значков на панели инструментов Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения).
- Можно добавлять примечания к хроматограмме с помощью инструмента Annotation (Примечание).
- Можно запустить различные операции с помощью контекстного меню. Если щелкнуть хроматограмму правой кнопкой мыши в окне результатов хроматограммы соединения (Compound Chromatogram Results), появится контекстное меню.

Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

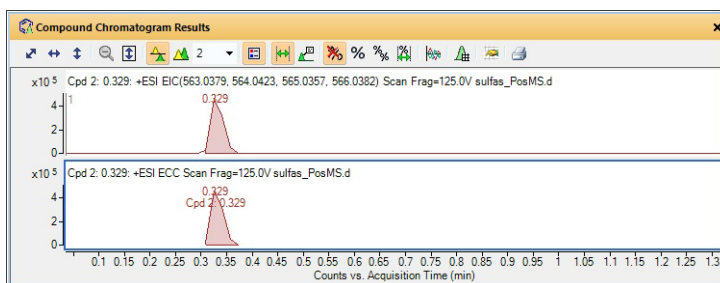


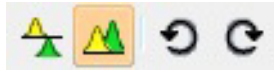



Рис. 89 Окно Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения)

Инструменты окна Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения)

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования	<ul style="list-style-type: none"> • Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба • Режим связанной оси Y
	<ul style="list-style-type: none"> • List mode (Режим списка) — хроматограммы построены таким образом, что каждая из них имеет отдельную ось Y. • Overlay mode (Режим наложения) — хроматограммы построены на одних и тех же осях X и Y • Number of chromatograms to show (Количество показываемых хроматограмм) — количество хроматограмм, которые должны быть одновременно показаны перед добавлением полосы прокрутки. Этот параметр появляется, когда вы выбираете режим List (Список). • Cycle to Previous Plot (Переход к предыдущему графику) или Cycle to next plot (Переход к следующему графику). Эти параметры появляются, когда вы выбираете режим Overlay (Наложение).
	
или	
	

Значок панели инструментов	Действие
	<ul style="list-style-type: none"> • Show legend in Overlay mode (Показать условные обозначения в режиме наложения) — если выбран режим наложения, можно определить, должны ли отображаться условные обозначения. Когда показан график совместного элюирования, этот параметр также используется для отображения соответствующих условных обозначений. • Выбор диапазона (Range Select) — если функция включена, можно обозначить диапазон хроматограммы, к которому нужно применить действия. • Annotation (Аннотирование) — если функция включена, можно добавлять изображения и текстовые комментарии к хроматограммам.
Инструменты масштабирования	<ul style="list-style-type: none"> • Прекращение масштабирования хроматограмм • Масштабирование всех хроматограмм по наибольшему пику на любой из них • Масштабирование каждой из хроматограмм по наибольшему пику на ней • Масштабирование каждой из хроматограмм по наибольшему пику в пределах выбранного диапазона
Другие инструменты	<ul style="list-style-type: none"> • Скрывается или отображается график совместного элюирования (Coelution Plot) • Скрывается или отображается список пиков интегрирования (Integration Peak List) • Открытие диалогового окна Chromatogram Display Options (Параметры отображения хроматограммы) • Печать отображенных хроматограмм

Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы) В этом окне показаны хроматограммы для каждой пробы, выбранной в окне таблицы проб (Sample Table). Это может быть хроматограмма полного ионного тока (TIC) или хроматограмма пиков базовой линии (BPC). Можно использовать наложение с хроматограммами соединений. УФ хроматограммы, извлеченные в процессе выполнения алгоритма поиска по формуле (Find by Formula), также отображаются в этом окне. Можно экспортировать и напечатать график.

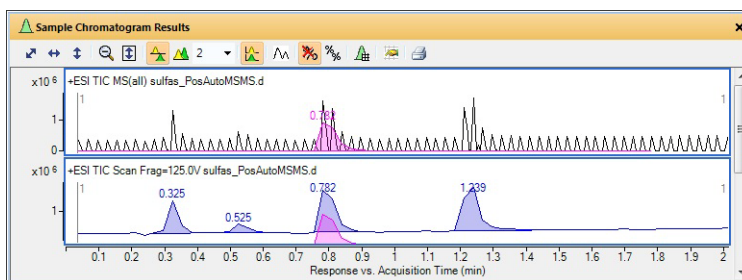
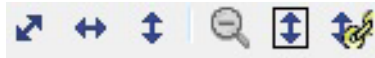

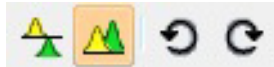

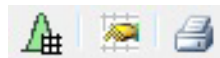


Рис. 90 Окно Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы)

Инструменты окна Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы)

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования	<ul style="list-style-type: none"> • Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба
	<ul style="list-style-type: none"> • List mode (Режим списка) — хроматограммы построены таким образом, что каждая из них имеет отдельную ось Y. • Overlay mode (Режим наложения) — хроматограммы построены на одних и тех же осях X и Y • Number of chromatograms to show (Количество показываемых хроматограмм) — количество хроматограмм, которые должны быть одновременно показаны перед добавлением полосы прокрутки. Этот параметр появляется, когда вы выбираете режим List (Список). • Cycle to Previous Plot (Переход к предыдущему графику) или Cycle to next plot (Переход к следующему графику). Эти параметры появляются, когда вы выбираете режим Overlay (Наложение).
	
или	
	

Значок панели инструментов	Действие
	<ul style="list-style-type: none"> • Compound Overlay mode (Режим наложения соединений) — хроматограммы соединений также отображаются в окне результатов для хроматограммы пробы (Sample Chromatogram Results). • Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм) — открывается диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм).
Инструменты масштабирования	<ul style="list-style-type: none"> • Прекращение масштабирования хроматограмм • Масштабирование каждой из хроматограмм по наибольшему пику на ней
	
Другие инструменты	<ul style="list-style-type: none"> • Отображается таблица списка пиков для хроматограммы • Открытие диалогового окна Chromatogram Display Options (Параметры отображения хроматограммы) • Печать отображенных хроматограмм
	

Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения) В этом окне показаны масс-спектры, связанные с выбранными соединениями (если выбрано одно или два соединения). Когда выбрано больше двух соединений, показаны только спектры первых двух выделенных соединений. Спектры МС-МС показаны в окне Compound Fragment Spectrum (Спектр фрагмента соединения). К спектру в этом окне можно добавить примечания и циркули. Можно отобразить список пиков, который будет показан в таблице в правой части этого окна. Для каждого показанного спектра добавляется отдельная вкладка. Можно отправлять спектры в персональную библиотеку точных масс (PCDL), экспортировать их и печатать.

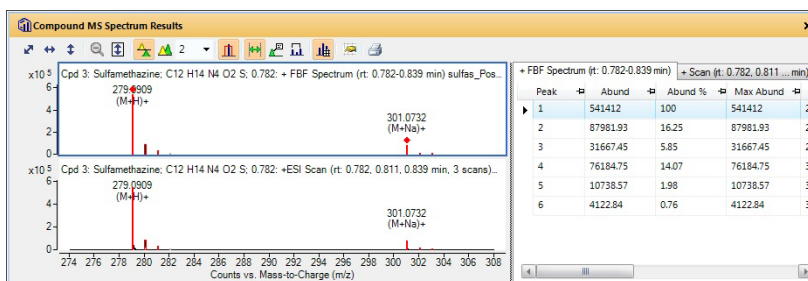

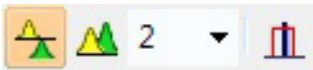

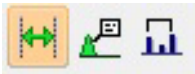



Рис. 91 Окно Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения)

Инструменты окна Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения)

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования 	<ul style="list-style-type: none"> • Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба
 <p>или</p> 	<ul style="list-style-type: none"> • List mode (Режим списка) — спектры построены таким образом, что каждый из них имеет отдельную ось Y. • Overlay mode (Режим наложения) — спектры построены на одних и тех же осях X и Y • Number of spectra to show (Количество показываемых спектров) одновременно перед добавлением полосы прокрутки. Этот параметр появляется, когда вы выбираете режим List (Список). • Cycle to Previous Plot (Переход к предыдущему графику) или Cycle to next plot (Переход к следующему графику). Эти параметры появляются, когда вы выбираете режим Overlay (Наложение). • Show Predicted Isotope Distribution (Показать предполагаемое распределение изотопа)

Значок панели инструментов	Действие
<p data-bbox="358 291 672 317">Выбор инструментов по порядку</p>  <p data-bbox="358 479 815 618">Всегда должен быть выбран один из этих инструментов. На этом рисунке показан выбор инструмента Range Select (Выбор диапазона). Выбранный инструмент имеет оранжевый цвет фона.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li data-bbox="853 291 1282 404">• Range Select (Выбор диапазона) — если функция включена, можно обозначить диапазон спектра, к которому нужно применить действия. <li data-bbox="853 409 1282 522">• Annotation (Аннотирование) — если функция включена, можно добавлять изображения и текстовые комментарии к спектрам. <li data-bbox="853 527 1282 670">• Calipers (Измерители) — если функция включена, можно добавить измеритель разности масс к выбранному спектру. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).
<p data-bbox="358 690 558 716">Другие инструменты</p> 	<ul style="list-style-type: none"> <li data-bbox="853 690 1282 751">• Отображается таблица списка пиков для спектра <li data-bbox="853 756 1282 864">• Открывается диалоговое окно MS and MS/MS Spectra Display Options (Параметры отображения спектров MS и MS-MS) <li data-bbox="853 869 1282 895">• Печать отображенных спектров

Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения) В этом окне показаны спектры МС-МС, связанные с выбранными соединениями (если выбрано одно или два соединения). Когда выбрано больше двух соединений, показаны только спектры МС-МС первых двух выделенных соединений. Спектры МС показаны в окне Compound MS Spectrum (Спектр МС соединения). К спектру фрагмента соединения (Compound Fragment Spectrum) можно добавить примечание и циркули.

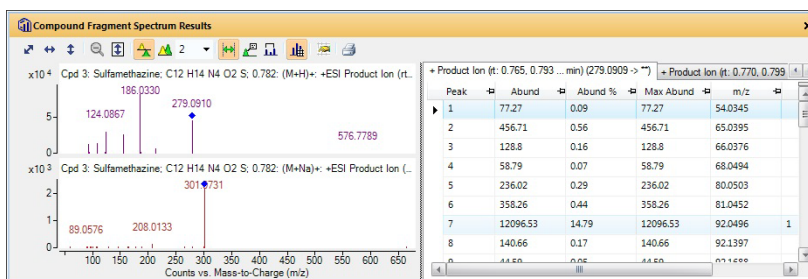



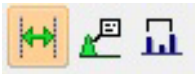



Рис. 92 Окно Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения) с соответствующим списком пиков

Инструменты окна Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения)

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования 	<ul style="list-style-type: none"> • Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба
	<ul style="list-style-type: none"> • List mode (Режим списка) — спектры построены таким образом, что каждый из них имеет отдельную ось Y. • Overlay mode (Режим наложения) — спектры построены на одних и тех же осях X и Y • Number of spectra to show (Количество показываемых спектров) одновременно перед добавлением полосы прокрутки. Этот параметр появляется, когда вы выбираете режим List (Список). • Cycle to Previous Plot (Переход к предыдущему графику) или Cycle to next plot (Переход к следующему графику). Эти параметры появляются, когда вы выбираете режим Overlay (Наложение).
или	
	

Значок панели инструментов	Действие
Выбор инструментов по порядку 	<ul style="list-style-type: none"> • Range Select (Выбор диапазона) — если функция включена, можно обозначить диапазон спектра, к которому нужно применить действия. • Annotation (Аннотирование) — если функция включена, можно добавлять изображения и текстовые комментарии к спектрам. • Calipers (Измерители) — если функция включена, можно добавить измеритель разности масс к выбранному спектру. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).
Другие инструменты 	<ul style="list-style-type: none"> • Отображается таблица списка пиков для спектра • Открывается диалоговое окно MS and MS/MS Spectra Display Options (Параметры отображения спектров MS и MS-MS) • Печать отображенных спектров

Difference Results (Разница результатов) После того как вы выполнили алгоритм поиска в библиотеке (Search Library) и с его помощью определили соединение, в этом окне появляются три спектра. Первый — спектр, который вы искали. Второй — спектр разницы. Для его получения библиотечный спектр вычитается из спектра пользователя. Третий — библиотечный спектр, который в данный момент выбран в окне результатов определения спектра (Spectrum Identification Results).

Окна в программе Qualitative Analysis Workflows

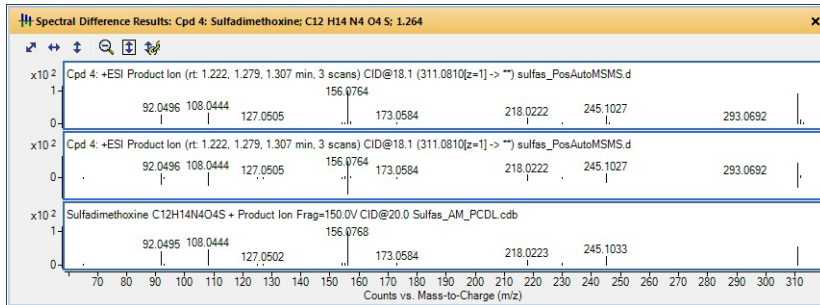


Рис. 93 Окно Difference Results (Результаты по разнице)

Compound Identification Results (Результаты определения соединений) В этом окне показаны результаты алгоритма определения, например создания формул (Generate Formulas) или поиска в библиотеке/базе данных (Search Library/DB).

Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT	RT (Tgt)	RT Diff	Score (RT)	Species	Flags	Notes
1	Sulfamethizole	C9 H10 N4 O2 S2	271.0319	271.0319	270.0245	-0.12	0.326					(M+H)+		
	Score (iso. abund)	Score (mass)	Score (MFG, MS/MS)	Score (MFG)	Score (iso. spacing)	Height	Ion Formula	Species	Lib/DB					
	30.11	99.99	99.48	73.98		49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+			D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDL		
	30.11	99.98	99.48	73.98		49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+			D:\MassHunter\PCDL\default		
CE	Name	Forward Score	Flags	Species	Lib/DB	Notes	Num Peaks	m/z (prec)	Reverse Score	Score (Lib)				
10	Sulfamethizole	87.84		(M+H)+	D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDLcdb		4	271.0318	99.65	99.65				

Рис. 94 Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений)

MS/MS Formula Details (Сведения о формулах MS/MS) В этом окне показана таблица с возможными формулами, вычисленными для фрагментов, которые видны в спектре MS-MS и которые соответствуют предложенной формуле. Результаты в этой таблице связаны с выбранной в данный момент строкой формулы в таблице Compound Identification Results (Результаты определения соединений). Данные из этой таблицы используются для вычисления значений столбца Score (MFG, MS/MS) (Степень (MFG, MS-MS)) в таблице Compound Identification Results (Результаты определения соединений).

m/z	Formula	Height %	Diff (ppm)	Loss Mass	Loss Formula
64.0193	C4 H2 N	0.07	-17.85	207.0127	C4 H5 N3 O7
64.0193	C H4 O3	0.07	-59.71	207.0154	C7 H3 N4 O4
65.0388	C5 H5	0.47	-3.22	205.9923	C3 H2 N4 O7
69.0694		0.11			
80.0486	C5 H6 N	0.26	11.38	190.9814	C3 H N3 O7
80.0486	H6 N3 O2	0.26	-38.88	190.9855	C8 H N O5
87.0429	C2 H5 N3 O	0.22	-2.34	183.9882	C6 H2 N O6
87.0429	C4 H7 O2	0.22	13.09	183.9869	C4 N4 O5
89.0599	C2 H7 N3 O	0.19	-17.21	181.9726	C6 N O6
92.0494	C6 H6 N	7.71	0.5	178.9814	C2 H N3 O7
92.0494	C H6 N3 O2	7.71	-43.2	178.9855	C7 H N O5
107.0716		0.07			

Рис. 95 Окно MS/MS Formula Details (Сведения о формулах MS-MS)

Structure Viewer (Средство просмотра структуры) Структуры могут привязываться к спектру при выполнении алгоритма поиска в библиотеке/базе данных (Search Library/DB), если база данных или библиотека содержит структуру для наилучшего совпадения. Структура также может привязываться, когда вы добавляете или изменяете выполненное вручную определение спектра. В окне средства просмотра структуры (Structure Viewer) есть две вкладки. На вкладке Structure (Структура) представлена структура в графическом виде. На вкладке MOL Text (Текст MOL) показано текстовое описание структуры.

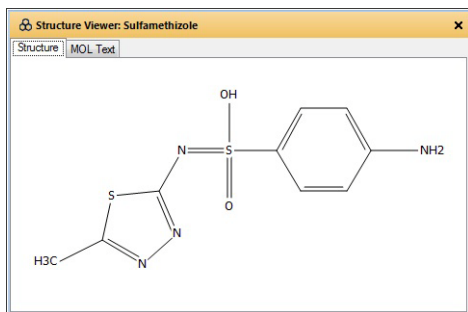


Рис. 96 Окно Structure Viewer (Средство просмотра структуры)

Программы Qualitative Analysis Navigator и Workflows

Компоновка

Вы можете открывать и сохранять различные компоновки. Также можно изменять любые из указанных ниже атрибутов. Они будут сохранены в компоновке. Программное обеспечение поставляется с двумя компоновками по умолчанию: default.xml (программа Qualitative Analysis Workflows) и CDN_Default.xml (программа Qualitative Analysis Navigator).

Компоновка определяет:

- Положение и размер каждого окна
- Какие окна будут отображаться как вкладки
- Какие окна будут плавающими
- Какое окно на вкладке будет сверху
- Какие окна будут отображаться по умолчанию
- Будет ли отображаться строка состояния

Для каждого окна графиков (в Qualitative Analysis Navigator: окна Chromatogram Results (Результаты хроматограммы), Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров), MS Spectrum Results (Результаты спектра МС), Difference Results (Результаты по разнице), UV Results (Результаты УФ); в Qualitative Analysis Workflows: Sample Chromatogram Results (Результаты хроматограммы пробы), Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения), Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединения) и Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединения), Difference Results (Результаты по разнице)) сохраняется следующее:

- Накладываются ли друг на друга графики
- Включено ли автоматическое масштабирование оси Y в режиме изменения масштаба
- Включен ли режим связанной оси Y

Для каждого окна таблиц сохраняется следующее:

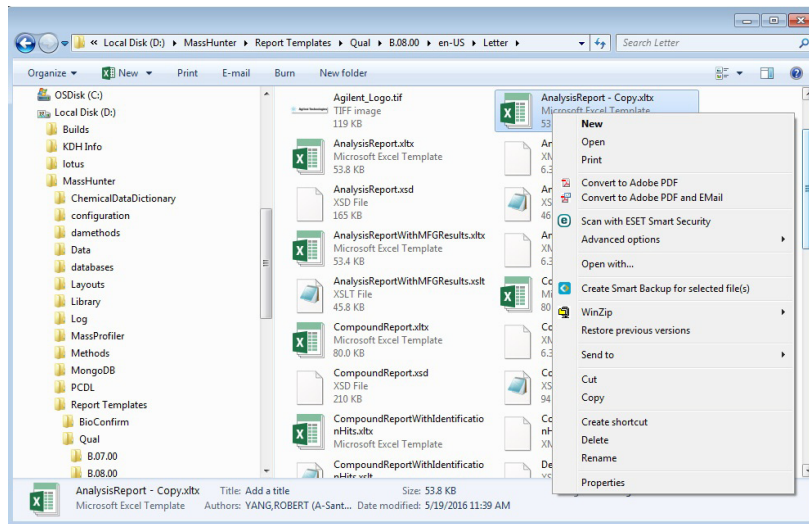
- Какие столбцы отображаются
- Порядок столбцов
- Ширина каждого столбца

- Фильтры, добавленные в таблицу (доступно только для таблицы Compound List (Список соединений), таблицы Compound Identification Results (Результаты определения соединений) и окна Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)).

Настройка шаблона отчета

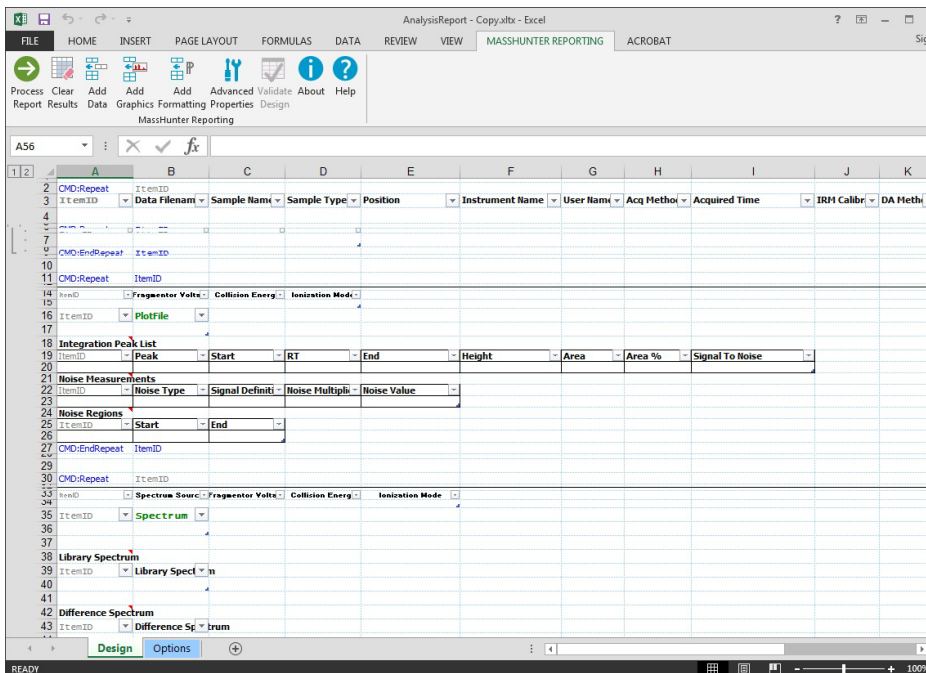
Для получения подробной информации об изменении шаблона отчета см. онлайн-справку (Help) встроенного дополнения MassHunter Report Designer Add-in, руководство по ознакомлению с Report Designer или обучающие материалы на DVD-диске Reporting Training. При выполнении следующих действий вы ознакомитесь с настройкой шаблонов. Эти инструкции касаются только шаблона отчета Microsoft Excel.

- 1 Перейдите в папку с шаблонами отчетов. По умолчанию это папка **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.08.00\en-US\Letter**. Можно выбрать другую папку в редакторе методов (Method Editor): для этого откройте Method Automation (Автоматизация метода) > Reports (Отчеты) > вкладку Templates (Шаблоны).
- 2 Создайте копию шаблона, который нужно изменить.
- 3 Щелкните правой кнопкой мыши копию и выберите пункт **Properties** (Свойства). Если необходимо, снимите отметку пункта **Read-only** (Только чтение). Затем щелкните правой кнопкой мыши копию и выберите пункт **Open** (Открыть) в контекстном меню.



После открытия шаблона можно изменять заголовки и колонтитулы. Также можно добавлять, удалять и перемещать столбцы параметров. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

Много шаблонов устанавливаются вместе с программой Qualitative Analysis (качественного анализа).



4 Сделайте необходимые изменения.

Для получения дополнительной информации о том, как изменять шаблоны, см. онлайн-справку (Help) встроенного дополнения MassHunter Report Designer add-in или обучающие материалы *Agilent MassHunter Reporting - Training DVD*.

- 5 Чтобы сохранить новый шаблон, нажмите кнопку Microsoft Office **Save** (Сохранить) или **Save As** (Сохранить как) > **Other Formats** (Другие форматы).
- 6 Введите название файла и щелкните **Save** (Сохранить).

File name:	AnalysisReport - Copy.xlsx
Save as type:	Excel Template (*.xltx)

www.agilent.com

В этой книге

Руководство содержит информацию для обучения использованию ПО Agilent MassHunter Workstation – программа качественного анализа с данными ГХ/МС. Программное обеспечение Qualitative Analysis состоит из двух основных программ.

© Agilent Technologies, Inc. 2017

Редакция А, январь 2017 г.



G3335-98197



Agilent Technologies