MassHunter Quantitative Analysis для ГХ/МСД

Ознакомительное руководство

Примечания

© Agilent Technologies, Inc. 2018

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

G3335-98200

Издание

Второе издание, август 2018г.

Напечатано в США

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

Гарантия

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

Технологические лицензии

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

Ограничение прав

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

Предупреждающие сообщения

ВНИМАНИЕ!

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

ОСТОРОЖНО!

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

В данном руководстве

В этом ознакомительном руководстве приведены упражнения с пошаговыми инструкциями, которые помогут научиться пользоваться программой Quantitative Analysis. Для упражнений можно использовать каталоги серий, расположенные в папке VoaDemoBatches. См. **Шаг 2** на стр. 4..

1 «Настройка нового метода из полученных данных сканирования»

В этом упражнении вы создадите метод с использованием данных сканирования, собранных ранее с помощью одноквадрупольного прибора.

2 «Просмотр результатов количественного анализа»

В этом упражнении вы просмотрите данные, касающиеся пробы и соединений, в файле серии, измените макеты для результатов и экспортируете данные в файл Microsoft Excel.

3 «Соединения навскидку»

В этом упражнении вы изучите функцию «Соединения навскидку» и узнаете, как с ее помощью экономить время на обзорах.

4 «Выбросы и сообщения о количественном анализе»

В этом упражнении вы выполните обзор результатов серии, используя указатели выбросов для таблицы серии и функции сообщений о количественном определении.

5 «Создание отчетов о количественном анализе»

В этом упражнении вы создадите методы отчета с помощью одного или нескольких шаблонов, узнаете, как сформировать отчет, и просмотрите эти отчеты в Microsoft Excel.

Подготовка к выполнению упражнений

1 Убедитесь, что демонстрационные файлы скопированы на ваш компьютер.

Для выполнения упражнений необходимо скопировать указанные ниже папки серий в каталог данных MassHunter на компьютере.

- VoaDemo
- VoaSampleData

Эти две папки можно найти в папке **VoaDemoBatches**, которая устанавливается на вашем компьютере одной из следующих программ:

- программа установки с диска MassHunter Supplemental;
- программа установки GC/MS Software Information and Manuals (G1701-60172).

Эти файлы **могли быть автоматически скопированы на ваш компьютер** во время первоначальной установки программного обеспечения MassHunter. Проверьте, есть ли папки серий в стандартном каталоге MassHunter (**MassHunter/Data/QuantExamples/MS/VoaDemoBatches**).

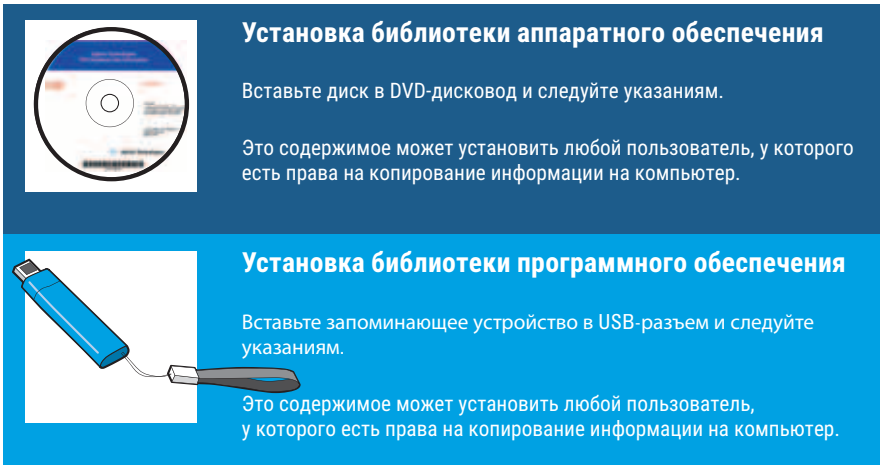
Если этих файлов еще нет на компьютере, установите их с помощью одной из двух указанных выше программ. Затем скопируйте папки с названиями **VoaDemo** и **VoaSampleData** из места их установки в каталок данных MassHunter, например **/MassHunter/GCMS/1/Data**.

2 Просмотрите дополнительную информацию.

К оборудованию и программному обеспечению прилагается полный набор руководств, видеофильмов, пользовательских приложений и средств разработки методов. Они находятся:

- на дисках, предназначенных для установки программного обеспечения MassHunter;
- на USB-носителе с информацией о программном обеспечении ГХ/МС (GC/MS Software Information USB, G1701-60172).

Просмотрите, что содержится в этих библиотеках (если вы еще этого не сделали). Здесь можно найти большое количество полезной информации.



Выбор значков рабочего стола для программы Quantitative Analysis

Программа Quantitative Analysis B.09.00 предусматривает значки рабочего стола для классического пользовательского интерфейса и пользовательского интерфейса Quant-My-Way. Классический пользовательский интерфейс по виду и принципу работы напоминает пользовательский интерфейс версии Quantitative Analysis B.08.00 с инструментами и параметрами, размещенными в строке меню. Пользовательский интерфейс Quant-My-Way имеет современную ленту, при этом инструменты и параметры расположены на вкладках и лентах, а не в строке меню. Вы можете установить на рабочий стол значки классического пользовательского интерфейса, значки пользовательского интерфейса Quant-My-Way или и те, и другие.

В данном *ознакомительном руководстве* рассматривается классический пользовательский интерфейс. Однако в него включены и выделены синим элементы, которые отличаются в пользовательском интерфейсе Quant-My-Way.

Содержимое

В данном руководстве 3
Подготовка к выполнению упражнений 4
Выбор значков рабочего стола для программы Quantitative Analysis 6

1 Настройка нового метода из полученных данных сканирования 9

Задание 1. Создание серии калибровочных проб 10
Задание 2. Добавление калибровочных соединений в метод 13
Задание 3. Задание соединений и квалификаторов в таблице метода 18
Задание 4. Добавление калибровочной кривой 33
Задание 5. Добавление нового соединения в метод 40
Задание 6. Преобразование метода сканирования в метод SIM 45
Создание методов SIM 47
Из собранных данных SIM 47
По одному соединению за раз 47
Из метода SIM 48
Из метода сканирования 48

2 Просмотр результатов количественного анализа 49

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии 50
Задание 2. Изменение макета главного окна 54
Задание 3. Доступ к параметрам интегрирования 61
Задание 4. Конфигурация параметров в окне «Сведения о соединении» 64
Задание 5. Экспорт результатов в Excel 71

3 Соединения навскидку 72

Задание 1. Просмотр окна «Соединения навскидку» 73
Задание 2. Отображение свойств в окне «Соединения навскидку» 85

4 Выбросы и сообщения о количественном анализе 89

Задание 1. Просмотр выбросов 90
Задание 2. Просмотр сообщений количественного анализа 95
Задание 3. Отладка выбросов 97

5 Создание отчетов о количественном анализе 101

Задание 1. Создание метода отчета 102
Задание 2. Формирование отчета 108

1 Настройка нового метода из полученных данных сканирования

Задание 1. Создание серии калибровочных проб 10

Задание 2. Добавление калибровочных соединений в метод 13

Задание 3. Задание соединений и квалификаторов в таблице метода 18

Задание 4. Добавление калибровочной кривой 33

Задание 5. Добавление нового соединения в метод 40

Задание 6. Преобразование метода сканирования в метод SIM 45

Создание методов SIM 47

В этом упражнении вы создадите метод количественного анализа, используя ранее полученные данные сканирования. MassHunter анализирует файл данных, определяет названия соединений, целевой ион, ионы-квалификаторы, соотношения и значения времени удерживания на основании указанных параметров поиска идентификаторов, а также вместе с другими параметрами по умолчанию использует эту информацию для заполнения исходных значений для метода количественного анализа. Это значительно сокращает время, необходимое для создания метода.

Для создания метода количественного анализа из данных сканирования существуют и другие методы, но этот метод демонстрирует максимальное количество функций в редакторе методов, которые способствуют ознакомлению с MassHunter. Все параметры редактора методов, описанные в данном разделе, также применимы к методам количественного анализа SIM. Фактически этот метод сканирования можно легко преобразовать в метод SIM, в чем вы убедитесь в дальнейшем. Данное упражнение заканчивается обзором по созданию методов SIM.

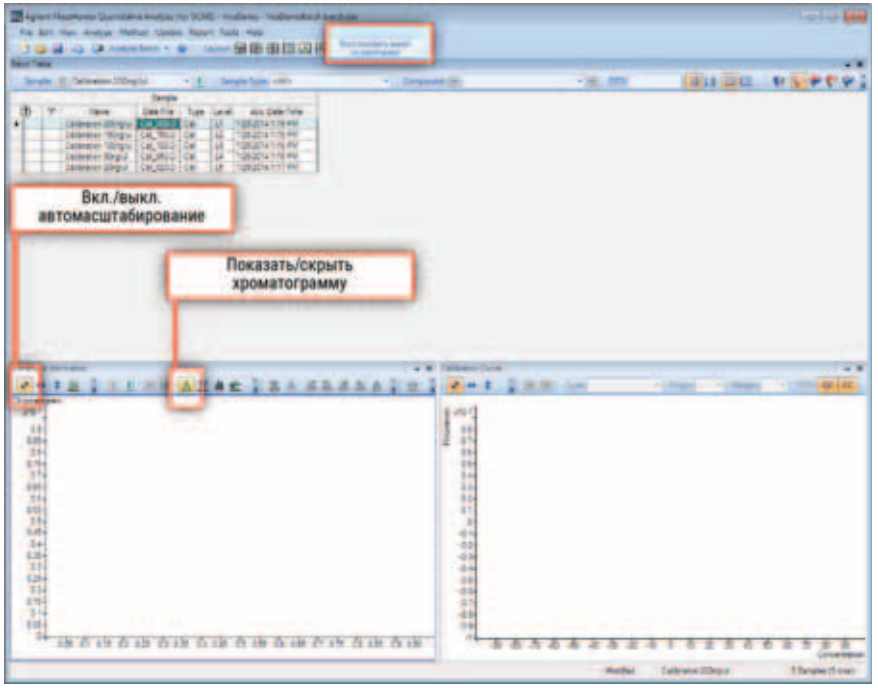
Задание 1. Создание серии калибровочных проб

В процессе выполнения данного задания вы создадите метод с помощью данных сканирования, ранее созданных из одноквадрупольного прибора.

1 Запустите приложение **Quantitative Analysis**.

a Воспользуйтесь значком на рабочем столе **MS Quantitative Analysis**, чтобы открыть приложение для количественного анализа MassHunter Quantitative Analysis. Запустится программа одноквадрупольного анализа данных МСД.

b Нажмите **Восстановить макет по умолчанию** и снимите флажки со всех значков в панели инструментов **Сведения о соединении**, кроме значков **Вкл/выкл автомасштабирование** и **Показать/скрыть хроматограмму**. Ваш экран должен иметь аналогичный вид.

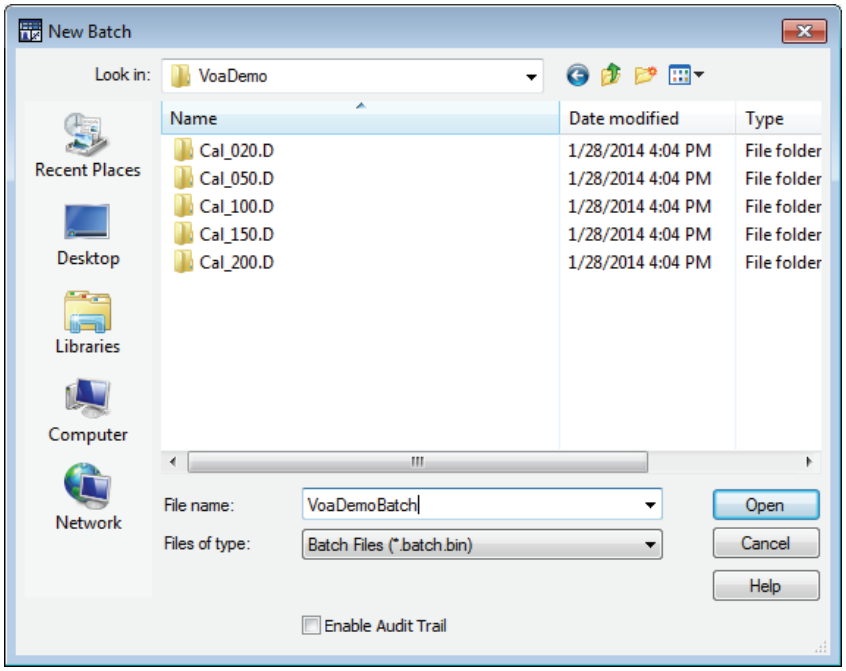


2 Перейдите к серии, содержащей файлы данных, которые необходимо использовать.

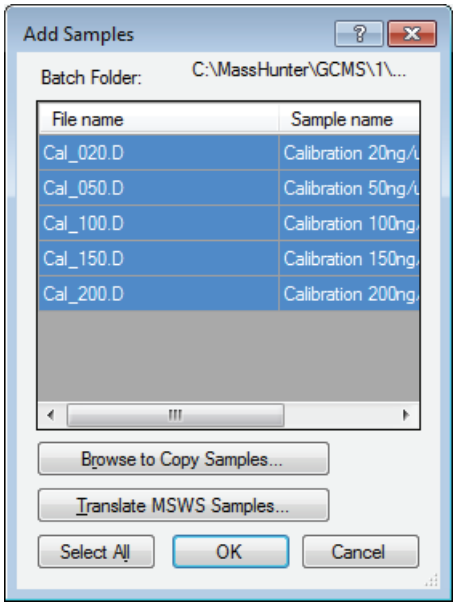
a Выберите **Файл > Новая серия**.

b Воспользуйтесь раскрывающимся списком **Просмотреть**, чтобы перейти к каталогу, где хранятся файлы данных. В данном случае: **C: > MassHunter > GCMS > 1 > Data > VoaDemo**.

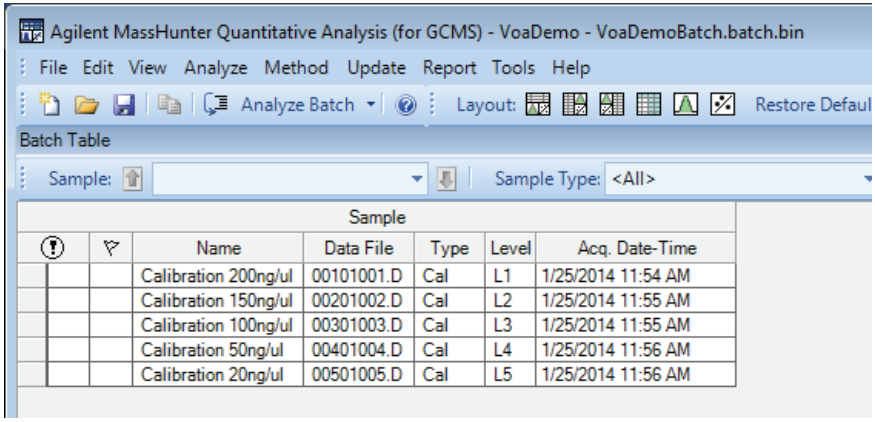
3 Введите для этой серии имя файла **VoaDemoBatch** и нажмите кнопку **Открыть**.



4 Выберите файлы для серии. Можно выбрать отдельные файлы данных пробы или принять значение по умолчанию и добавить все файлы. В этом примере, поскольку мы будем использовать все эти файлы для создания калибровочной кривой, нажмите **OK**, чтобы принять значение по умолчанию и добавить все выбранные пробы в эту серию.



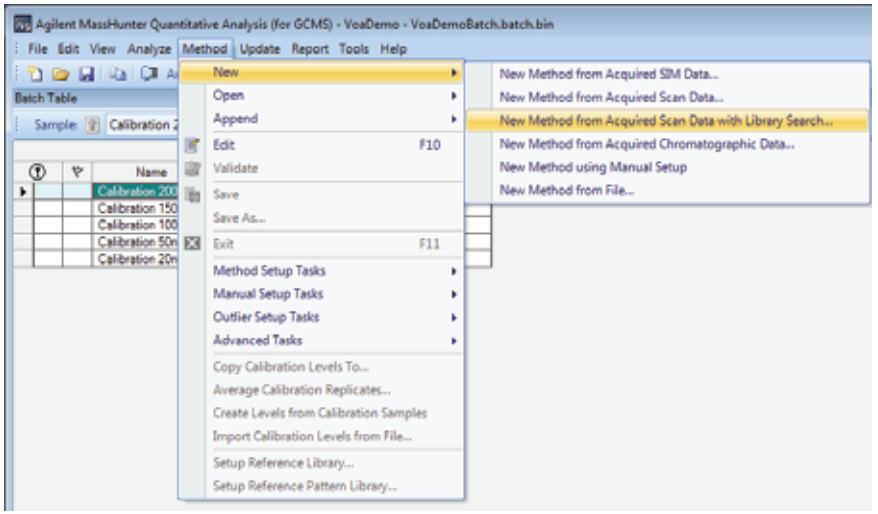
5 Просмотрите **Таблицу серии**. В **Таблицу серии** автоматически включаются **Название**, **Файл данных**, **Тип**, **Уровень** и **Дата, время сбора данных**.



Задание 2. Добавление калибровочных соединений в метод

Для используемой нами процедуры требуется библиотека, содержащая соединения в калибровочной пробе. При отсутствии доступа в такие обширные библиотеки, как NIST или Wiley, воспользуйтесь альтернативным процессом **Новый метод из полученных данных сканирования**, который в целом соответствует данной процедуре, однако он не выполнит идентификацию соединения по названию.

1 Выберите **Метод > Новый > Новый метод из полученных данных сканирования с помощью поиска в библиотеке**.



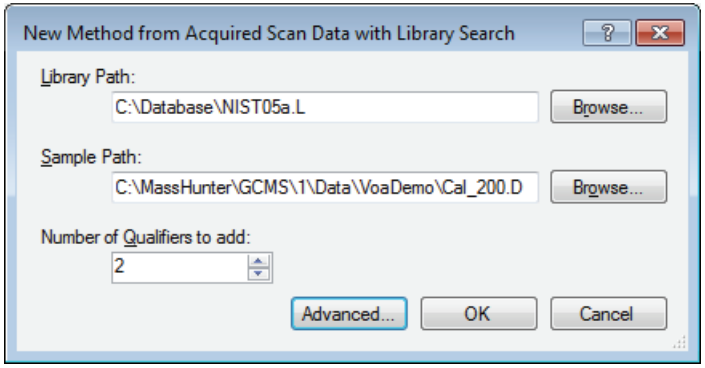
2 Перейдите к нужной библиотеке и выберите ее. Здесь используется библиотека NIST05.

3 Перейдите к файлу данных пробы, который необходимо использовать, выберите его и нажмите **Открыть**. Здесь используется CAL_200.

Помните, что это должен быть файл данных с высокими концентрациями интересующих калибровочных соединений и внутренних стандартов.

4 Введите максимальное количество квалификаторов для каждого соединения. Здесь мы указываем 2 квалификатора для каждого соединения. Если программа MassHunter не сможет найти максимум квалификаторов, то она покажет те, которые удалось найти.

5 Нажмите **Дополнительно**, чтобы появилось диалоговое окно **Параметры анализа сканирования**.

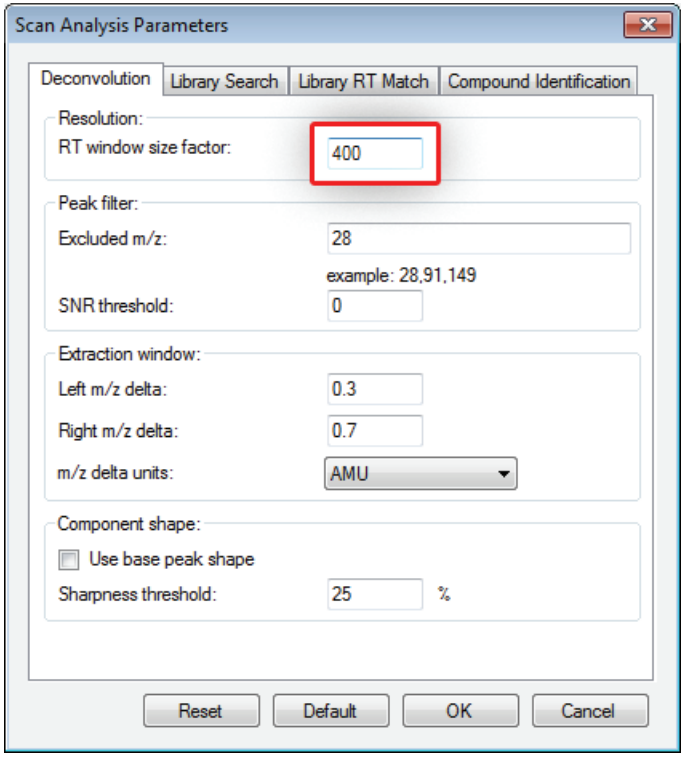


6 Нажмите **По умолчанию**, чтобы вернуть параметры во всех вкладках к их значениям по умолчанию.

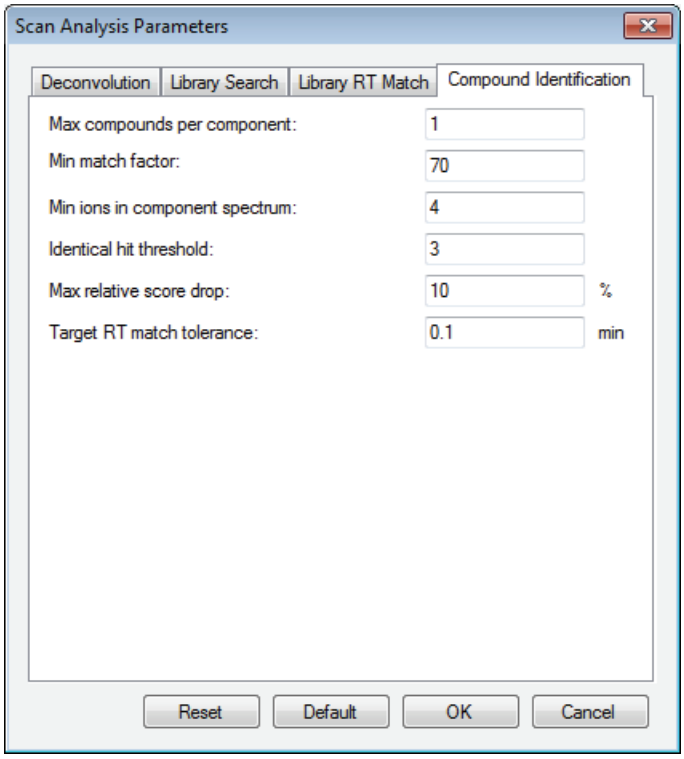
7 Во вкладке **Деконволюция** установите **Масштабный коэффициент окна ВУ** равным **400**.

Чем больше это число, тем меньшее количество соединений будет обнаружено посредством деконволюции. Поскольку пики в этих данных были хроматографически оптимизированы, необходимо уменьшить количество соединений, обнаруженных посредством деконволюции.

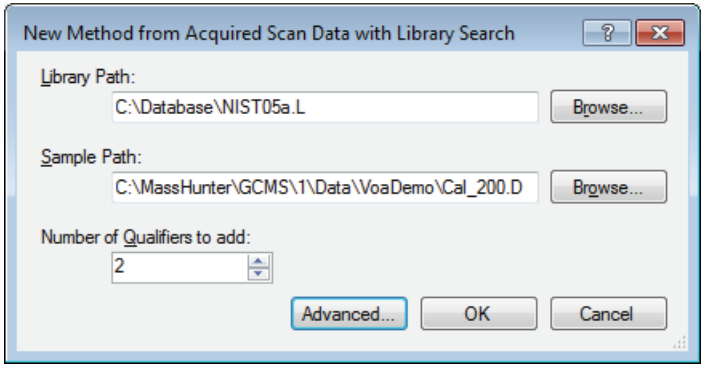
В этом случае при значении по умолчанию масштабного коэффициента окна ВУ, равном 100, будет определено 74 соединения, что слишком много для этого метода. При увеличении количества до 400 число обнаруженных соединений уменьшится до 38, что ближе к фактическому количеству калибровочных соединений в пробе.



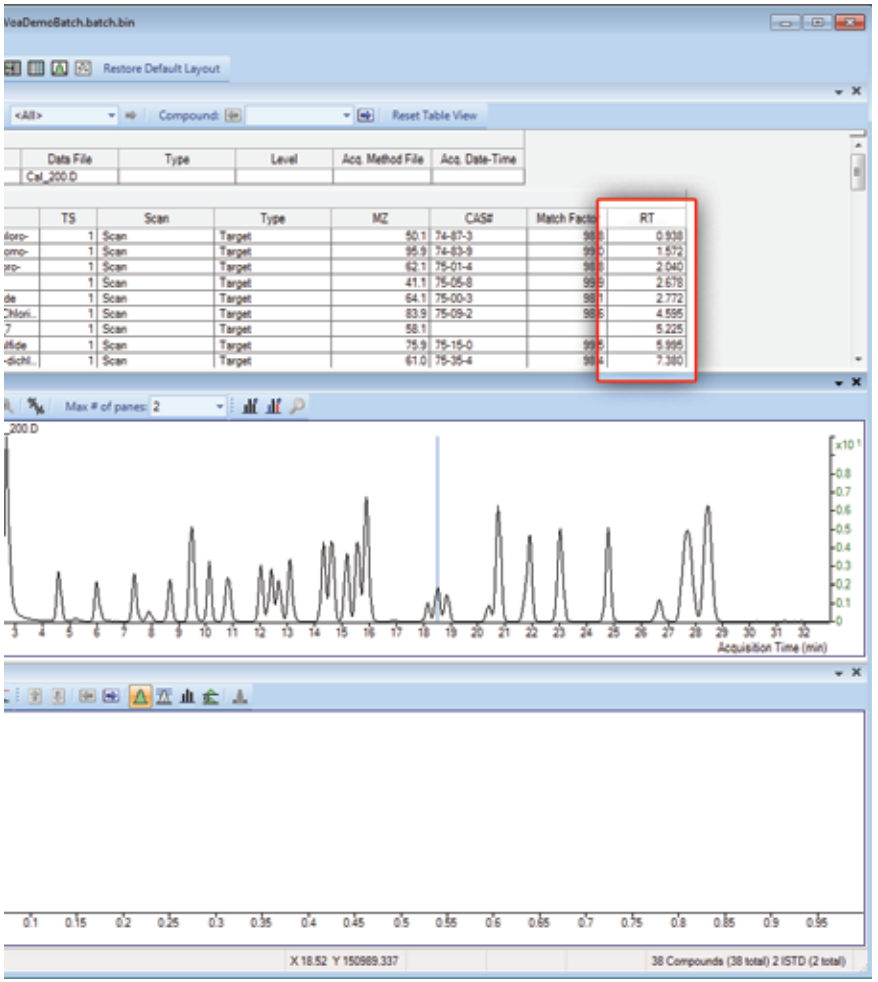
8 Во вкладке **Идентификация соединений** измените значение **Мин. коэф. совпадений** на **70**, затем нажмите **OK**, чтобы закрыть диалоговое окно **Параметры анализа сканирования**.



9 Нажмите **OK**, чтобы закрыть диалоговое окно **Новый метод из полученных данных сканирования с помощью поиска в библиотеке** и вернуться в **редактор методов**.



10 Просмотрите **Таблицу метода**. MassHunter обрабатывает калибровочные соединения на основе введенных параметров анализа сканирования и отображает целевые соединения калибровки и внутренние стандарты в представлении **редактора методов Таблицы метода** с сортировкой по времени удерживания (ВУ).



Задание 3. Задание соединений и квалификаторов в таблице метода

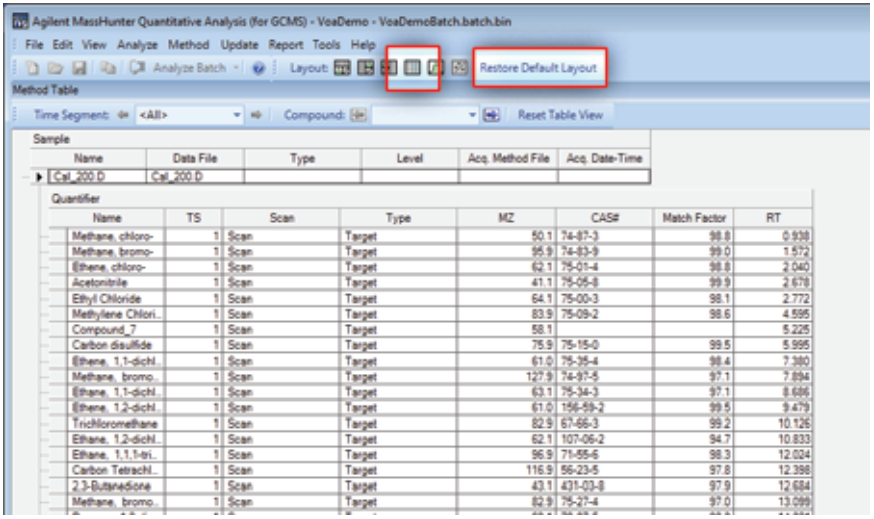
В данном задании вы будете делать следующее:

- просматривать список соединений и их квалификаторов, идентифицированных программой MassHunter;
- редактировать информацию о соединении в случае неправильной идентификации соединения или внутреннего стандарта;
- пересматривать квантификаторы и квалификаторы;
- проверять окно времени удерживания, а затем указывать внутренний стандарт для каждого калибровочного соединения;
- назначать квантификаторы внутреннему стандарту;
- устанавливать уровни концентрации;
- задавать калибровочную кривую.

1 Уберите с экрана окна **Сведения о соединении** и **Сведения о пробе**, щелкнув по значку **Развернуть таблицу**.

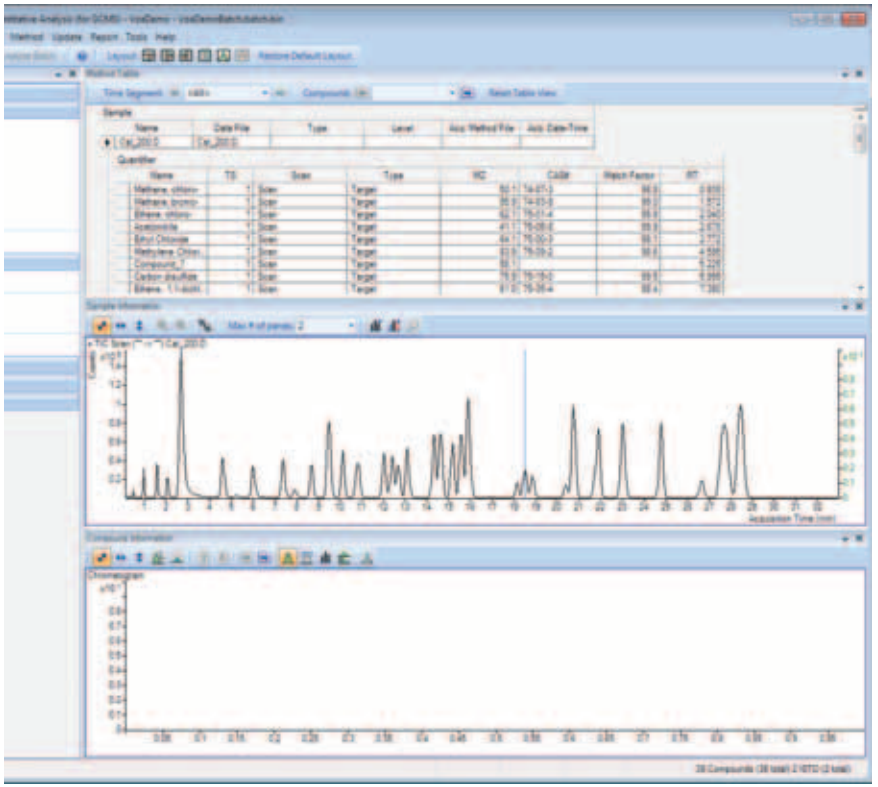
Во вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель** > **Развернуть таблицу**.

Отобразится только **Таблица метода**. Это представление позволяет увидеть все соединения в таблице, если это позволяет разрешение экрана. В библиотеке NIST обнаружено 40 соединений, в том числе одно неидентифицированное.

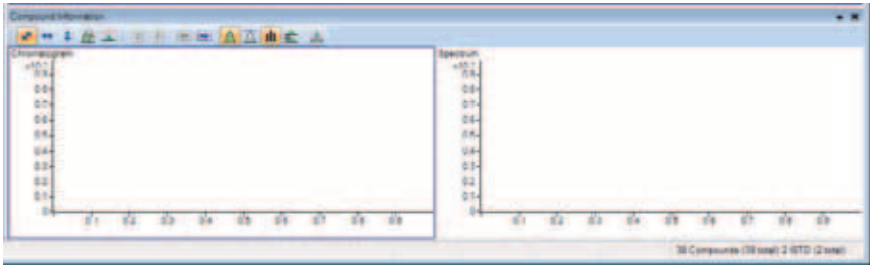


2 Нажмите **Восстановить макет по умолчанию**, чтобы вернуться к предыдущему представлению.

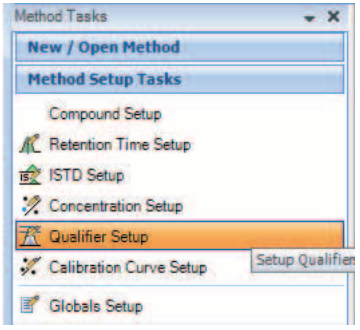
3 Просмотрите макет по умолчанию. Здесь вы видите область **Задачи метода**, **Таблицу метода**, окна **Сведения о пробе** и **Сведения о соединении**.



4 Щелкните значок **Показать/скрыть спектр** на панели инструментов **Сведения о соединении**, чтобы отобразить панель **Спектр** справа от панели **Хроматограмма**. Представления **редактора методов** должны быть идентичны приведенным здесь.

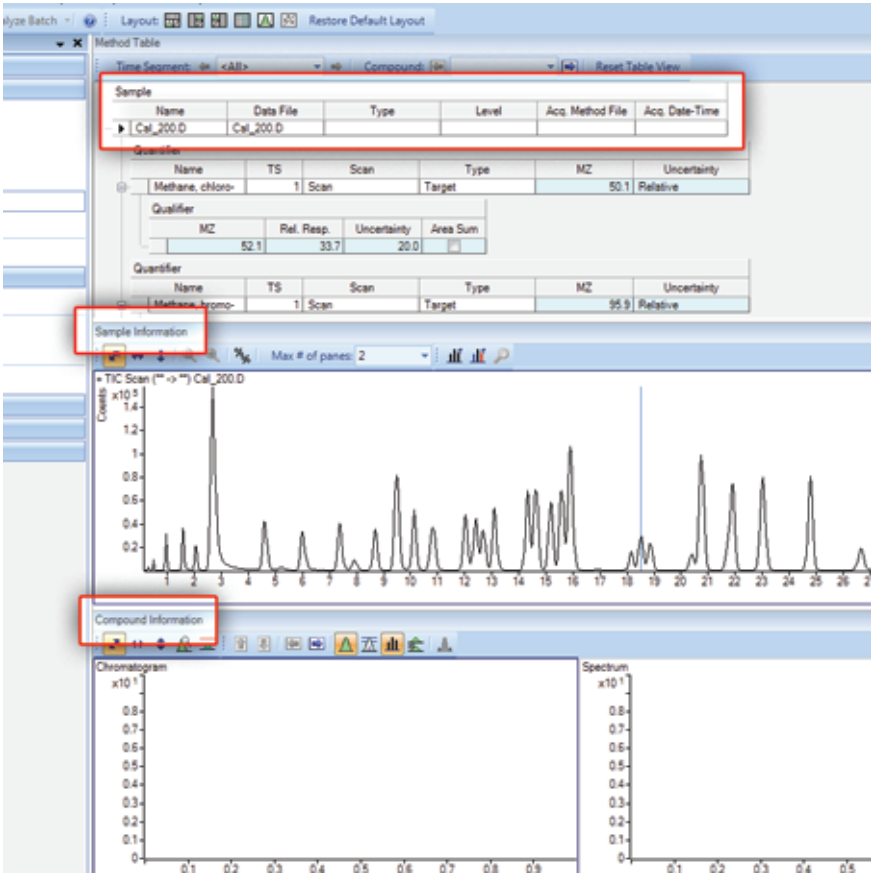


5 В области **Задачи метода** выберите **Задачи отладки метода > Отладка квалификатора**, чтобы отредактировать неправильно идентифицированные параметры соединения.



6 Обратите внимание, что выбрана проба **Cal_200.D**. Записи, выделенные голубым, представляют собой параметры, связывающие квалификатор с целевым соединением (квантификатором).

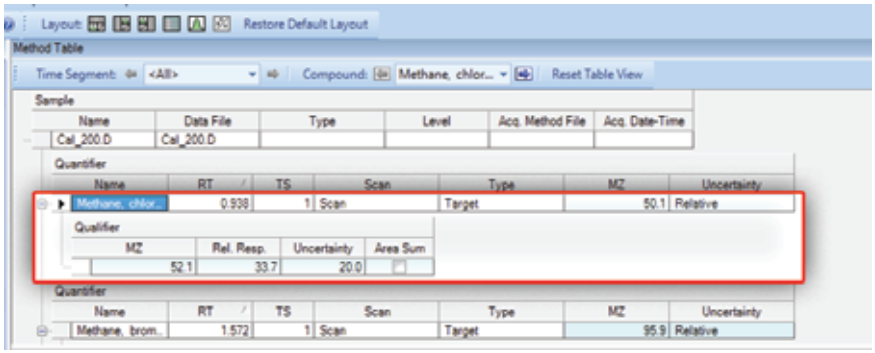
Треугольник с заливкой указывает на то, что проба выбрана. В окне **Сведения о пробе** отображается хроматограмма для этой пробы. Окно «Сведения о соединении» остается пустым, так как в **Таблице метода** не выбрано ни одно соединение.



7 Щелкните в поле названия квантификатора **метан, хлорметан**.

Треугольник с заливкой указывает на то, что соединение выбрано. Когда это соединение выбрано, пик выделяется на панели **Хроматограмма** окна **Сведения о пробе**, а также отображается на панелях **Хроматограмма** и **Спектр**.

8 Рассмотрим квалификаторы соединения. Квалификаторы соединения представлены в **Таблице метода** непосредственно под записью **Квантификатор**. Как вы можете видеть, для используемого нами квантификатора программа MassHunter выбрала только один квалификатор.

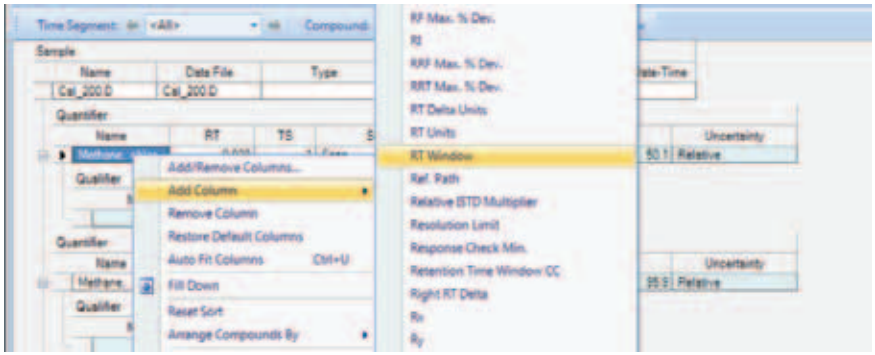


9 Добавьте **Время удерживания** в **Таблицу метода**. Так как это известные соединения, добавленные к калибровочной пробе, необходимо проверить запись каждого названия, целевой ион, ионы-квалификаторы и относительный отклик каждого иона-квалификатора.

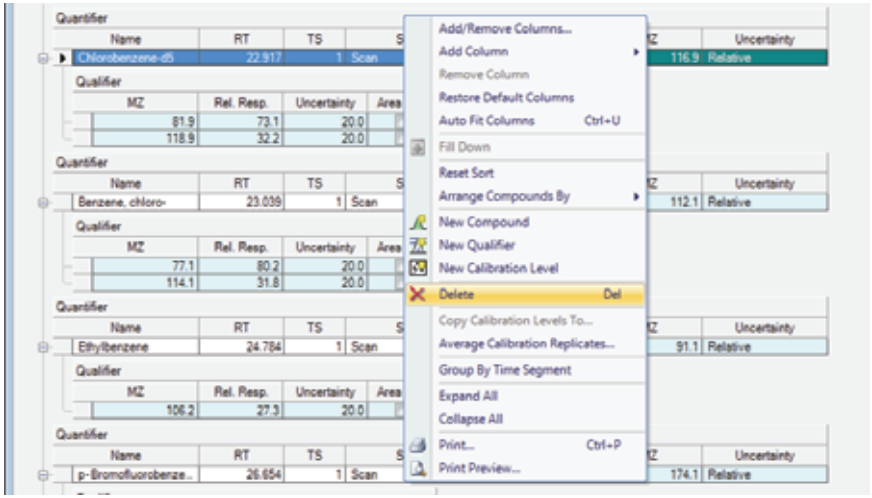
Щелкните значок **Развернуть таблицу** .

Во вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель** > **Развернуть таблицу**.

10 Щелкните правой кнопкой мыши по любому квантификатору и выберите **Добавить столбец > ВУ**, чтобы добавить столбец **Время удерживания (ВУ)** в **Таблицу метода**.



11 Что касается этого примера, мы знаем, что соединения Ацетонитрил при ВУ 2,678, Толуол-D8 при ВУ 21,71 и Хлорбензол-d5 при ВУ 22,91 не были добавленными калибровочными соединениями, поэтому удалите их, сначала выбрав соединение, а затем нажав клавишу **Delete**.

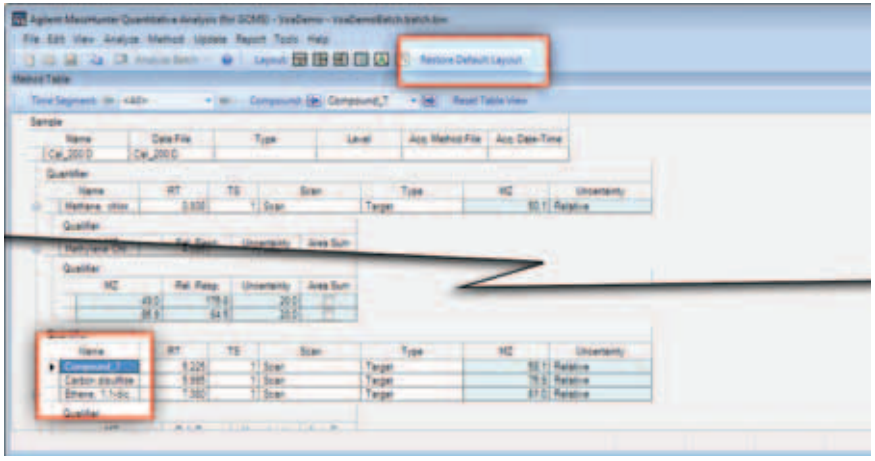


12 Воспользуйтесь функцией **Поиск по библиотеке**, чтобы идентифицировать неизвестное соединение.

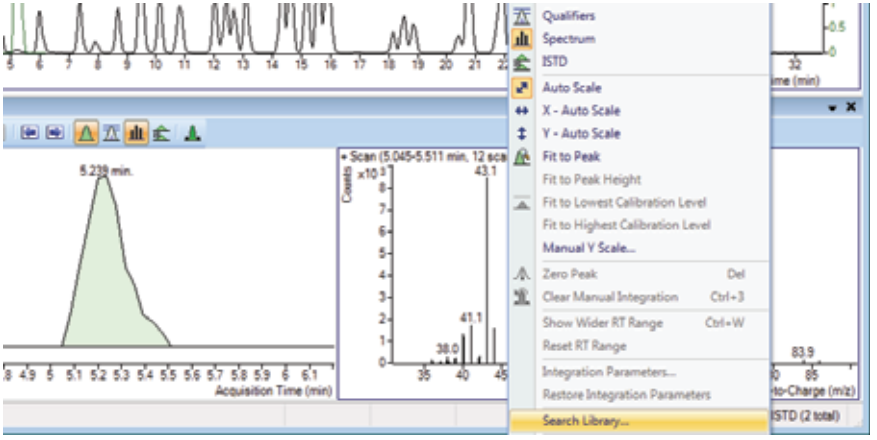
Программа MassHunter не смогла идентифицировать соединение, которому присвоила условное обозначение Соединение_7. Мы ожидали увидеть здесь Ацетон из нашей калибровочной пробы.

a Выберите **Соединение_7**.

b Нажмите **Восстановить макет по умолчанию**.



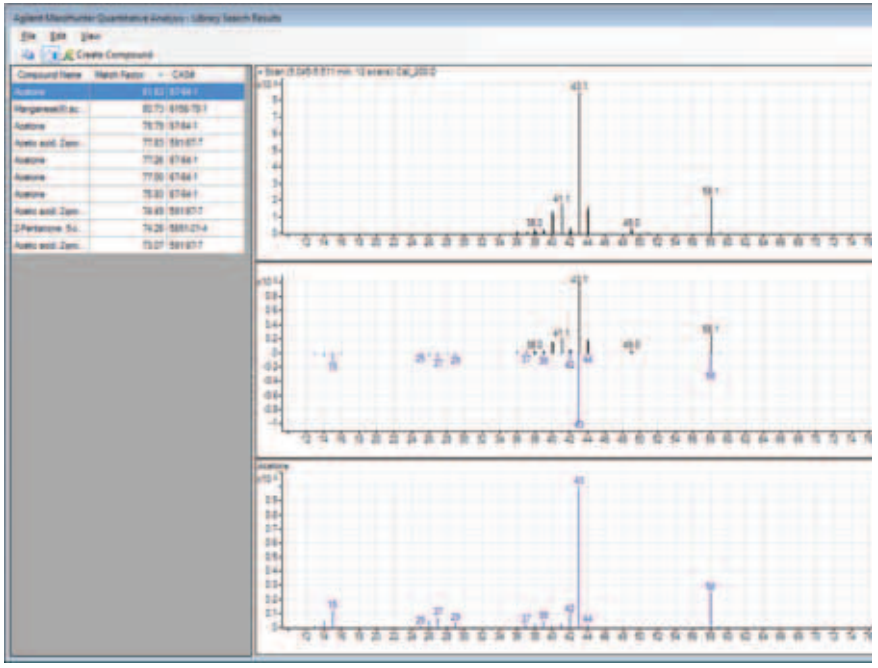
c Щелкните правой кнопкой мыши внутри панели **Спектр** окна **Сведения о соединении** и выберите **Поиск по библиотеке**.



d При возникновении запроса выберите свою библиотеку. Здесь используется библиотека NIST05.

e Нажмите **Открыть**, чтобы появилось окно **Результаты поиска в библиотеке**.

Соединение было идентифицировано как **Ацетон**, и мы видим, что спектр ацетона (нижний график) имеет целевой пик с m/z 43 и пик квалификатора с m/z 58. На верхнем графике представлен спектр в нашей калибровочной пробе, а центральный график является сравнительным, демонстрируя высокую степень соответствия.



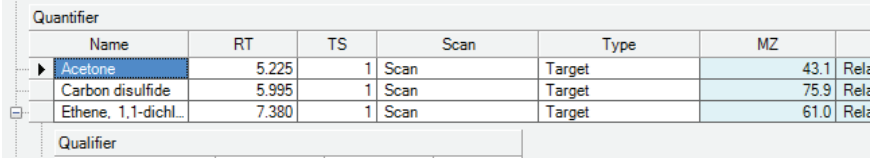
f На будущее запишите значение **Коэффициента совпадений** 81,63 и CAS# — 67-64-1.

g Закройте окно **Результаты поиска в библиотеке**.

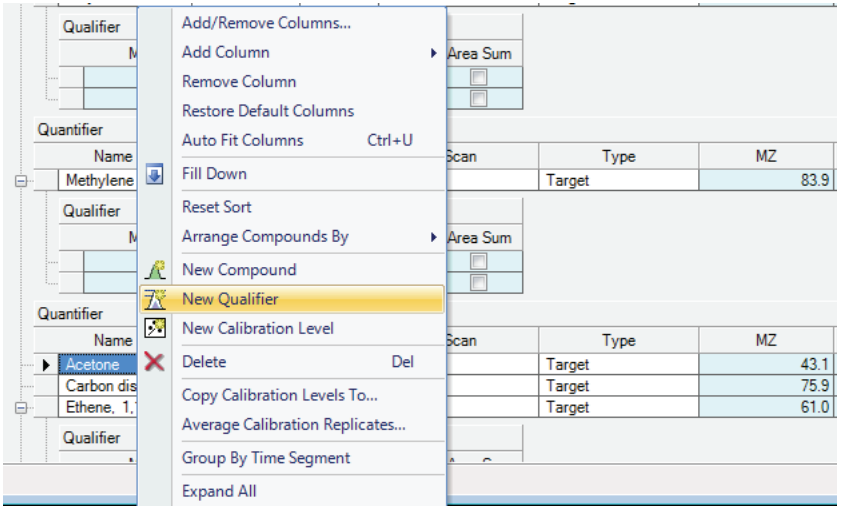
h Нажмите **Развернуть таблицу** .

Во вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель** > **Развернуть таблицу**.

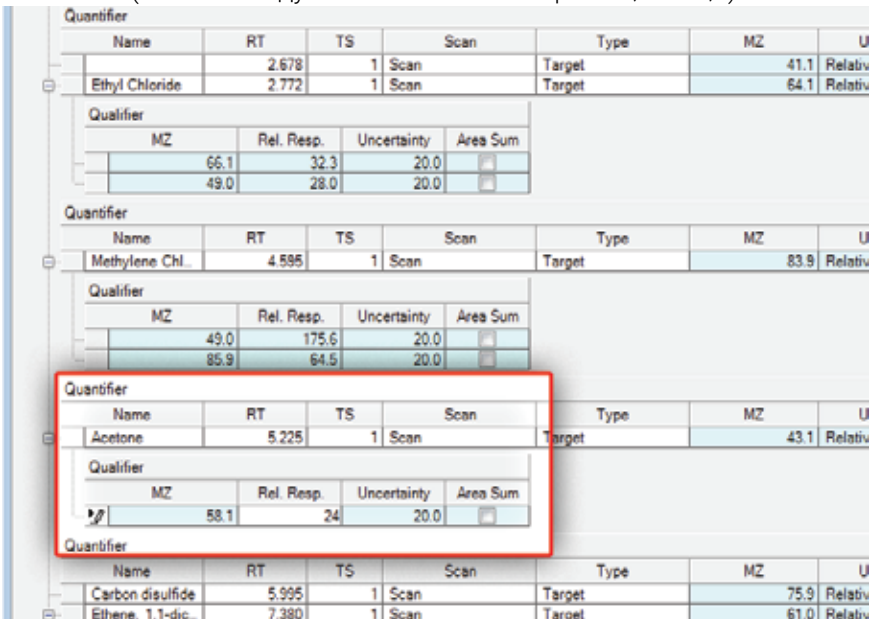
13 Измените параметр Соединения_7 **Название** на **Ацетон** и измените значение **MZ** ацетона на 43,1. Значение 58,1, идентифицированное как квантификатор, на самом деле является квалификатором.



14 Добавьте **Ацетон** в качестве квалификатора, щелкнув правой кнопкой мыши **Ацетон** и выбрав **Новый квалификатор** из контекстного меню. Квалификатор будет введен под квантификатором ацетона.



15 Введите **58,1** в качестве значения **MZ** квалификатора и **24** в качестве **Отн. откл.** (= 2.2/9 между ионным откликом проб 58,1 и 43,1).

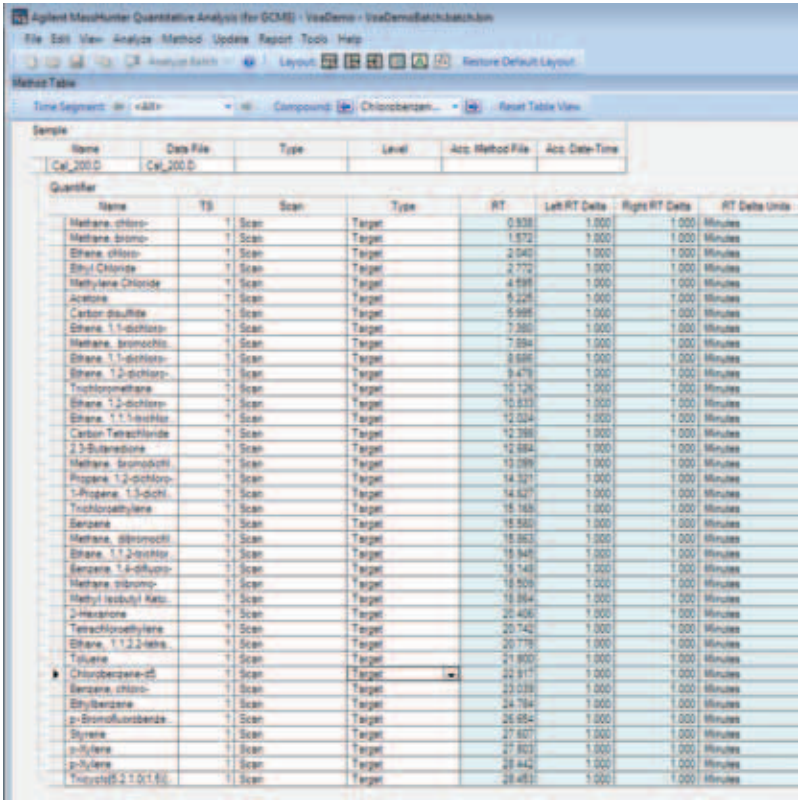


Продолжите просмотр всех соединений и их квалификаторов, идентифицированных в **Таблице метода**.

16 Просмотрите время удерживания.

a Нажмите **Восстановить макет по умолчанию**, затем в области **Задачи метода** выберите **Задачи отладки метода > Отладка времени удерживания**.

b Нажмите **Развернуть таблицу**, чтобы просмотреть все соединения, отсортированные по **ВУ**.



По умолчанию дельта ВУ слева и дельта ВУ справа создают приведенное здесь окно шириной 2 минуты с центром вокруг ВУ. При необходимости отредактируйте размер и ВУ этого окна.

17 Идентифицируйте внутренние стандарты, добавленные в пробу. Соединениям еще не назначены внутренние стандарты.

a Файл данных пробы содержит внутренние стандарты бромхлорметана, 1,4-дифторбензола и хлорбензола-d5.

Выберите **Метод > Задачи отладки метода > Отладка ISTD**, чтобы перейти к отладке внутреннего стандарта без выхода из представления **Развернуть таблицу**.

b Для этих трех внутренних стандартов проверьте **Флажок ISTD** и обратите внимание, что при этой проверке **Тип** устанавливается как **ISTD**. При снятии флажка в этом поле необходимо вручную установить **Тип** как **Целевое соединение**.

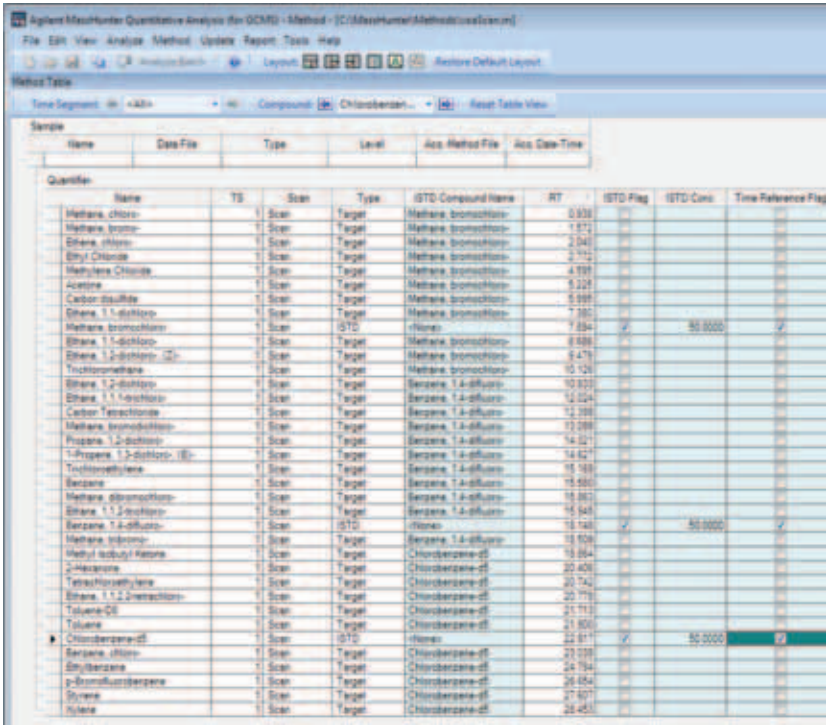
c Для этих трех внутренних стандартов также проверьте **Эталон по времени**. Таким образом указывается, что соотношение фактического и ожидаемого времени внутреннего стандарта используется в качестве множителя ВУ всех целевых соединений, назначенных внутреннему стандарту.

18 Назначьте внутренний стандарт **Метан, бромхлорметан** для калибровки соединений в диапазоне ВУ от 0,9 до 10,2. Для этого щелкните правой кнопкой мыши по внутреннему стандарту **Название соединения** для первого соединения и выберите **Заполнить вниз**, чтобы скопировать внутренний стандарт ко всем соединениям ниже его. При использовании функции «Заполнить вниз» необходимо изменить **Название соединения** внутреннего стандарта на **<нет>** для переопределенных внутренних стандартов.

19 Назначьте внутренний стандарт **1,4-дифторбензол** для калибровки соединений в диапазоне ВУ от 10,8 до 18,5.

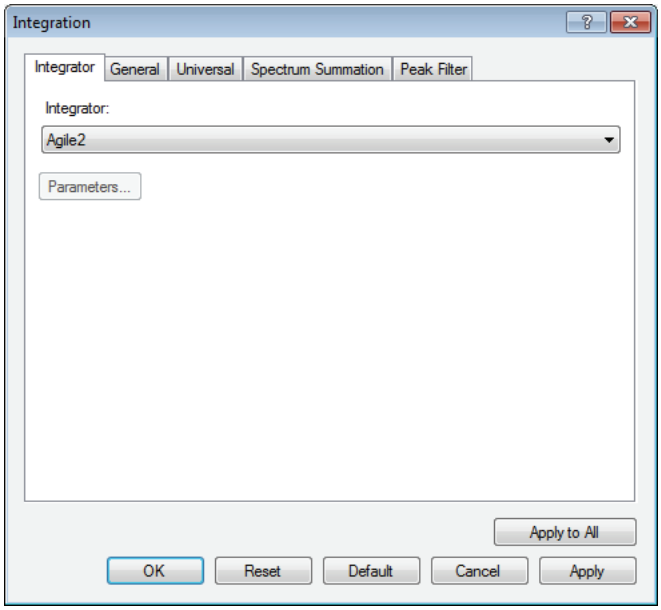
20 Назначьте внутренний стандарт **Хлорбензол-d5** для калибровки соединений в диапазоне ВУ от 18,8 до 29.

Ваш экран теперь должен выглядеть следующим образом.



21 Выберите **Метод > Дополнительные задачи > Отладка параметров интегрирования**. По умолчанию в области **Интегратор** указано значение **Agile2**. Это интегратор без параметров, рекомендуемый для данных МС-МС. Поскольку мы выполняем интегрирование данных одноквадрупольного анализа ГХ-МС, мы выберем более подходящий интегратор.

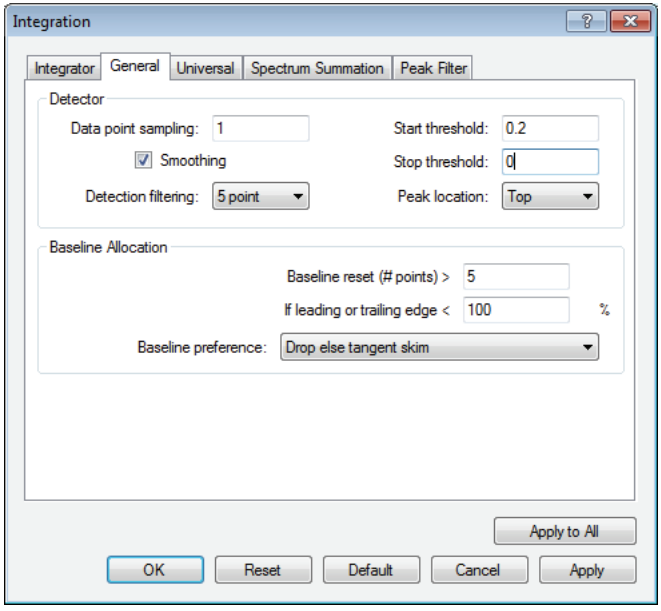
В столбце **Инт.** для первого соединения в **Таблице метода** щелкните в поле выбора. Откроется диалоговое окно **Интегрирование**. В нашем примере в качестве **Интегратора** показан **Agile2**.



22 В раскрывающемся списке **Интегратор** выберите **Общий**. Этот интегратор аналогичен интегратору Genie ChemStation, оптимизированному для интегрирования ГХ-МС.

23 Нажмите кнопку **Параметры**, чтобы открыть вкладку **Общий**.

24 Отредактируйте параметры в соответствии с диалоговым окном, представленным ниже.



25 Нажмите **Применить ко всем**, и этот интегратор с указанными параметрами будет скопирован для всех соединений в таблице. Нажмите кнопку **ОК**, чтобы закрыть диалоговое окно.

Задание 4. Добавление калибровочной кривой

1 Задайте уровни концентрации для калибровочных соединений.

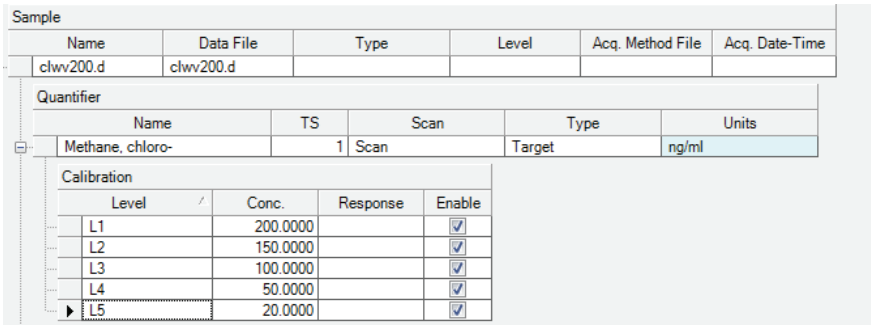
a Выберите **Метод > Задачи отладки метода > Отладка концентрации**.

b Выберите первое целевое соединение в таблице, затем щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Новый уровень калибровки**. Под таблице **Квантификатор** будет создана таблица **Калибровка** с одним уровнем.

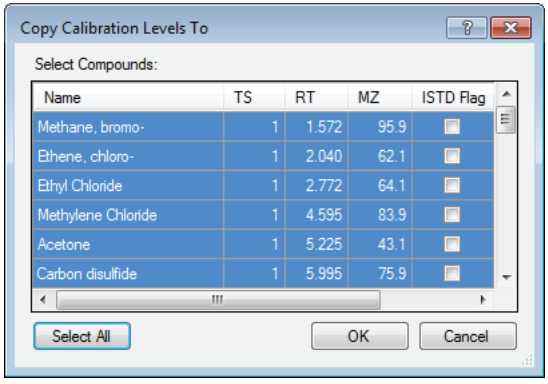
c Добавьте в эту таблицу еще четыре уровня.

d В столбце **Уровень** добавьте названия **L1**, **L2**, **L3**, **L4** и **L5**.

e В столбце **Концентрация** добавьте числа 200, 150, 100, 50 и 20. См. рисунок ниже.



2 Щелкните правой кнопкой мыши в таблице **Калибровка** и выберите **Копировать уровни калибровки в**.

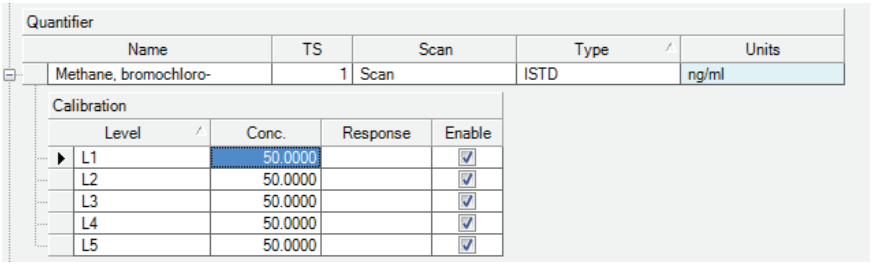


3 Нажмите **Выбрать все**, а затем щелкните **OK**, чтобы скопировать таблицу **Калибровка** ко всем целевым соединениям.

4 Задайте уровни калибровки для трех внутренних стандартов.

a В таблице **Квантификатор** щелкните по заголовку столбца **Тип**, чтобы отсортировать таблицу. Три внутренних стандарта перейдут в верхнюю часть **Таблицы метода**. Обратите внимание, что уровни не были добавлены во внутренние стандарты.

b Добавьте таблицу **Калибровка** с пятью уровнями к первому внутреннему стандарту. Для этого выберите внутренний стандарт, затем щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Новый уровень калибровки**. Повторите процесс еще четыре раза. Пометьте, как и раньше, уровни L1–L5 и укажите концентрацию 50 для всех уровней.


Quantifier

Name	TS	Scan	Type	Units
Methane, bromochloro-	1	Scan	ISTD	ng/ml

Calibration

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

c Повторите процесс, чтобы добавить идентичную таблицу **Калибровка** к двум другим внутренним стандартам.

5 Задайте калибровочную кривую.

a Выберите **Метод > Задачи отладки метода > Отладка калибровочной кривой**.

b Выберите первое соединение в таблице.

c Из раскрывающегося списка **АК** выберите **Среднее коэффициентов отклика**. Это хорошо подходит для наших данных.

d Щелкните правой кнопкой мыши по этой последней записи и выберите **Заполнить вниз**. Отобразятся следующие параметры аппроксимации кривой (АК) по умолчанию:

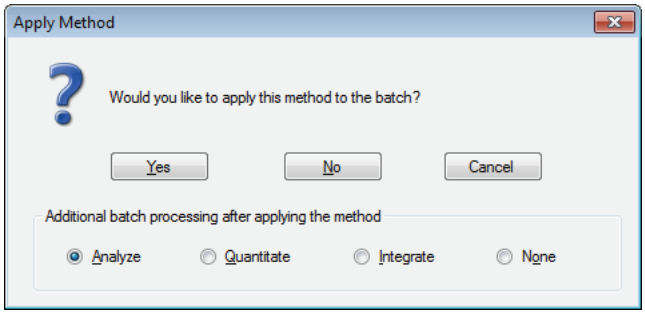
- **Игнорировать** — в столбце **Начало координат АК**
- **Нет** — в столбце **Коэффициент веса АК**

В нашем примере эти параметры следует оставить без изменений.

6 Выберите **Метод > Выход**.

7 Выберите **Анализ**, чтобы проанализировать всю серию после применения этого нового метода к серии.

8 Нажмите **Да**, чтобы начать анализ с применением этого метода. Вы выйдете из представления **редактор методов** и перейдете к представлению анализа серии.



Поскольку в последовательности сбора данных указано, что коэффициенты отклика соединений в каждой калибровочной пробе должны заменить коэффициенты отклика в методе количественного анализа, в результате этого анализа серии таблицы калибровки будут заполнены откликами соединения.

9 Просмотрите калибровочную кривую.

a Выберите первую пробу в таблице и обратите внимание, что в окне **Калибровочная кривая** представлена кривая, созданная по 5 уровням концентрации.

b Щелкните правой кнопкой мыши по заголовку столбца **Проба** в **таблице серии** и выберите **Авторазмещение столбцов**.

10 Щелкните значок **Развернуть калибровочную кривую**.

Во вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель** > **Развернуть калибровочную кривую**.

Черная линия представляет собой аппроксимацию кривой (АК), которую мы ранее применяли ко всем соединениям в методе. Ее параметры находятся в левой нижней части графика и также выделены черным. В первой строке представлена информация о названии соединения, количестве уровней и точек, использованных в уравнении АК.



11 Щелкните значок стрелки вправо на панели инструментов **Калибровочная кривая** несколько раз, чтобы выбрать соединение **Этилхлорид**.

На кривой отсутствует точка калибровки уровня L5. Попробуем назначить другую АК, которая позволит включить в кривую все 5 точек.

12 Изучите помощника аппроксимации калибровочной кривой.

a Щелкните правой кнопкой мыши окно **Калибровочная кривая** и выберите **Помощник аппроксимации калибровочной кривой**. Откроется таблица **Аппроксимация кривой**. В этой таблице должна быть выбрана первая строка. Цветная линия представляет собой кривую АК, выбранную в таблице **Аппроксимация кривой**. Ее параметры расположены под назначенной в настоящий момент АК и выделены тем же цветом, что и кривая.

b В таблице **Аппроксимация кривой** щелкните значок воронки **Число отключенных точек** и для фильтра столбца задайте значение **0**. Все элементы, оставшиеся в таблице, проходят через все 5 точек.

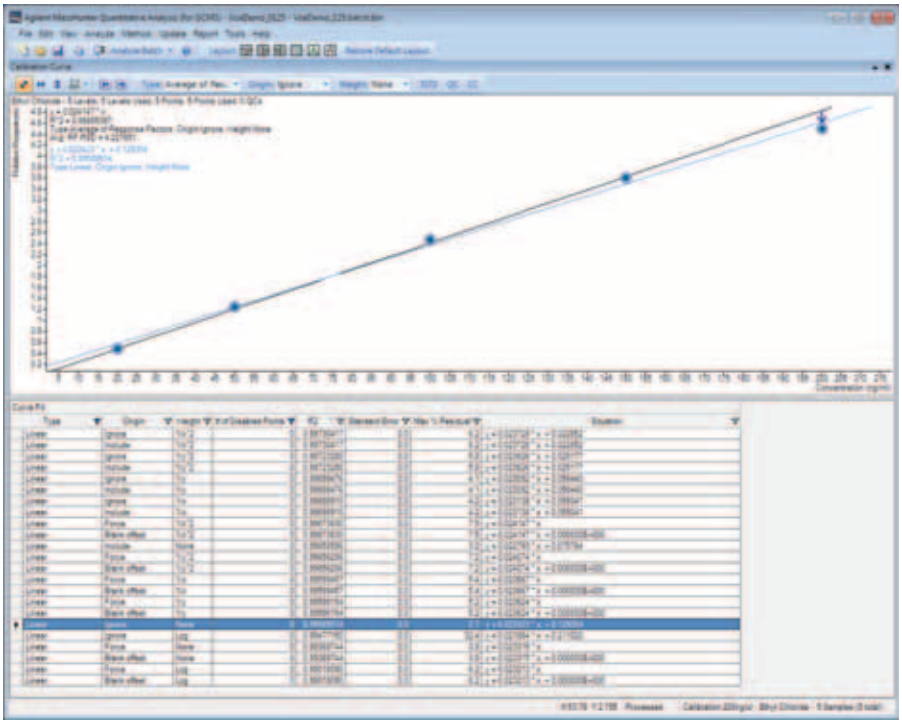
c Отсортируйте столбец **R2** таким образом, чтобы первое значение АК в таблице было ближе всего к 1,0. Выберите эту строку, чтобы убедиться, что кривая точно проходит через все 5 точек. Это квадратичная аппроксимация со взвешиванием, и следует проверить, подойдет ли что-то более простое.

d Щелкните значок воронки **Тип** и установите в фильтре столбца значение **Линейная**. Мы пропускаем простое среднее коэффициентов отклика, так как этот вариант не очень хорошо подходит для высоких концентраций.

e Выбирая различные строки, наблюдайте за цветной кривой. Хорошо подходит простая линейная кривая с игнорированием начала координат.

f Выберите **Игнорировать** в раскрывающемся списке **Начало координат**, а также выберите **Нет** в раскрывающемся списке **Вес**.

g Выбрав эту строку в таблице **Аппроксимация кривой** (значок треугольника с заливкой), щелкните правой кнопкой мыши в окне **Калибровочная кривая** и выберите **Принять кривую, построенную помощником**.



h Щелкните значок стрелки **Перейти к следующему соединению** на панели инструментов **Калибровочная кривая**.

i Просматривайте эту аппроксимацию кривой до тех пор, пока не будете удовлетворены аппроксимацией кривой для всех калибровочных соединений.

j Чтобы выйти из помощника, щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Помощник аппроксимации калибровочной кривой**.

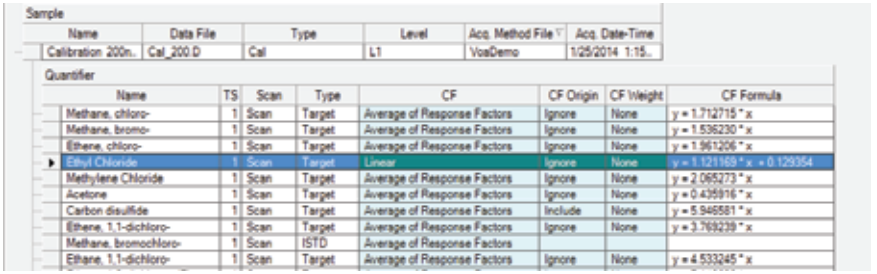
13 В **редакторе методов** просмотрите изменения аппроксимации кривой.

a Выберите **Метод > Правка**, чтобы войти в представление **редактор методов**.

b Выберите **Метод > Задачи отладки метода > Отладка калибровочной кривой**.

c Щелкните правой кнопкой мыши метку таблицы **Квантификатор** и выберите **Добавить/удалить столбцы**.

d Добавьте столбец **Формула АК**, чтобы просмотреть уравнение АК (выбранной). Помощник аппроксимации калибровочной кривой заменил Среднее коэффициентов отклика, изначально указанное этим методом, на выделенные ниже параметры линейной АК и формулу АК.



Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
Calibration 200n..	Cal_200.D	Cal	L1	VoaDemo	1/25/2014 1:15..

Quantifier

Name	TS	Scan	Type	CF	CF Origin	CF Weight	CF Formula
Methane, chloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.712715 * x
Methane, bromo-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.536230 * x
Ethene, chloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 1.961206 * x
Ethyl Chloride	1	Scan	Target	Linear	Ignore	None	y = 1.121169 * x + 0.129354
Methylene Chloride	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 2.065273 * x
Acetone	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 0.435916 * x
Carbon disulfide	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Include	None	y = 5.946581 * x
Ethene, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 3.769239 * x
Methane, bromochloro-	1	Scan	ISTD	Average of Response Factors			
Ethane, 1,1-dichloro-	1	Scan	Target	Average of Response Factors	Ignore	None	y = 4.533245 * x

e Выберите **Метод > Сохранить как**. Перейдите туда, куда необходимо сохранить метод. Дайте методу название. В нашем примере мы использовали **Voa**.

f Выберите **Метод > Выйти**, чтобы войти в представление анализа серии.

g Сохраните серию и выйдите из программы MassHunter.

Задание 5. Добавление нового соединения в метод

Теперь, когда метод содержит данные калибровочного соединения, необходимо добавить в метод новые соединения с помощью функции присоединения или посредством добавления в метод вручную отдельных соединений. Функции присоединения метода аналогичны описанным в предыдущих заданиях и интерактивной справке. Ниже описывается, как вручную добавить калибровочное соединение в метод.

1 Войдите в метод.

   a Выберите **Файл > Открыть серию**, а затем выберите файл **VOADemo.Batch.Bin**. В данных этой серии содержится новое калибровочное соединение во всех калибровочных пробах.

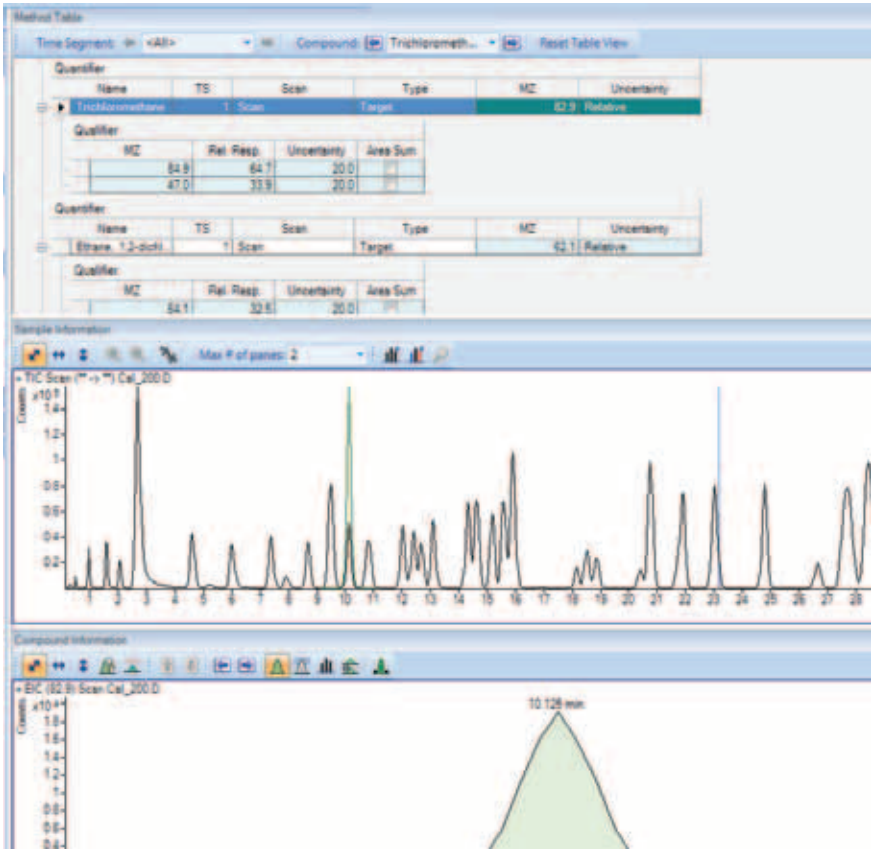
   b В **Таблице серии** выберите пробу **CAL_200**, после чего выберите **Метод > Правка**, чтобы перейти к **редактору методов**.

2 Подготовьте данные метода для этой демонстрации.

   a Выберите **Метод > Задачи отладки > Отладка квалификатора**, а затем выберите соединение **Трихлорметан**. Мы удалим соединение из метода, а затем снова добавим его вручную, чтобы продемонстрировать выполнение этого задания.

   b Перед удалением этого соединения обратите внимание на параметры целевого соединения и квалификатора. Также обратите внимание, что соединение со значением ВУ 10,125 минут выделено в окнах **Сведения о пробе** и **Сведения о соединении**. Этот пик мы и будем использовать в данном задании.

c Щелкните правой кнопкой мыши по соединению, выбранному в таблице **Квантификатор**, а затем нажмите **Удалить**.



3 Добавьте соединение в метод.

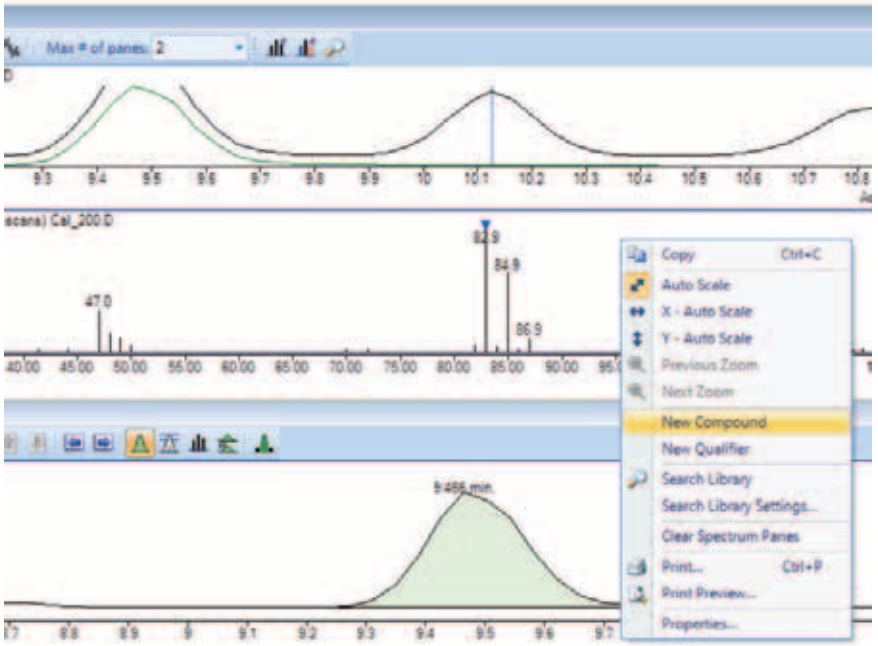
a В окне **Сведения о пробе** увеличьте (щелкните правой кнопкой мыши и перетащите) диапазон между 9 и 11 минутами.

b Щелкните по вершине пика, чтобы отобразить линию, проходящую через пик.

c Щелкните в окне правой кнопкой мыши и выберите команду **Извлечь спектр**. Просмотрите спектр и обратите внимание, что ион с m/z **82,9** является целевым соединением, а ионы со значениями m/z **84,9** и **47,0** — квалификаторами, исходя из интенсивности.

d Щелкните по строке иона с m/z **82,9**. Синий треугольник над этой строкой указывает на то, что ион выбран. Щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Новое соединение.** Соединение будет добавлено в таблицу **Квантификатор** в порядке ВУ.

e Добавьте **Трихлорметан** в пустую ячейку **Название** таблицы **Квантификатор**. Оставьте это соединение выделенным в **таблице методов** при добавлении квалификаторов на следующих шагах.



4 Отобразите спектр соединения и добавьте квалификаторы.

a Чтобы снова открыть спектр для **Трихлорметана**, щелкните вершину пика, чтобы отобразить линию, проходящую через вершину.

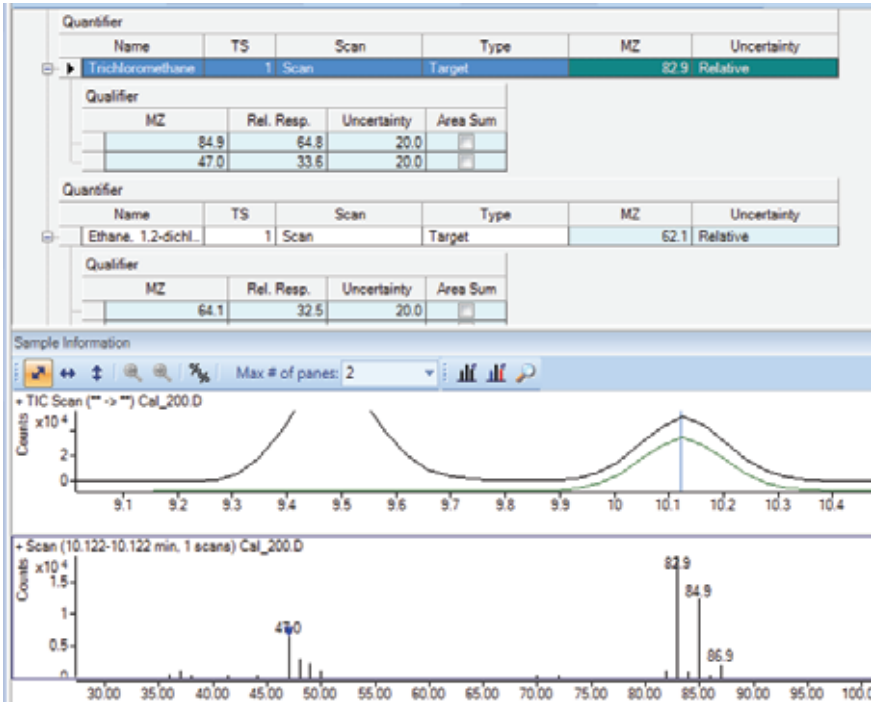
b Щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Извлечь спектр**.

c Выберите ион со значением m/z **84,9** (синий треугольник) на панели спектра, а затем выберите из контекстного меню **Новый квалификатор**. Ион будет добавлен в таблицу **Квалификатор**.

5 Добавьте второй квалификатор.

a Добавьте ион со значением m/z **47,0** в таблицу **Квалификатор** с помощью той же процедуры.

b Обратите внимание на запись **Трихлорметан** в **таблице методов**. Добавленные квалификаторы имеют рассчитанный и добавленный в таблицу относительный отклик. Также было добавлено значением по умолчанию относительной неопределенности, равное 20 %.



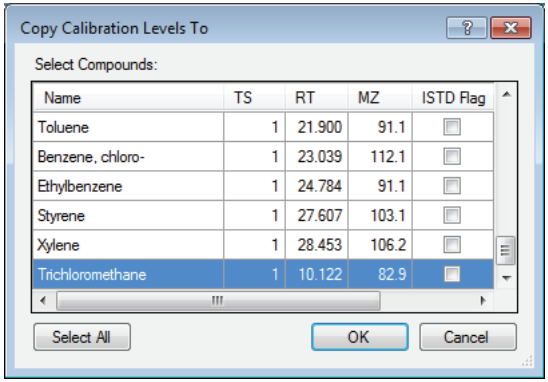
6 Просмотрите и обновите параметры метода для данного соединения.

a В меню **Задачи отладки метода** щелкните по каждой задаче и обратите внимание, какие из значений по умолчанию MassHunter следует пересмотреть. Например, для нового соединения необходимо назначить внутренний стандарт.

b Выберите **Задачи отладки метода > Отладка концентрации**.

c Щелкните правой кнопкой мыши соседнее соединение в **Таблице метода** и выберите **Копировать уровни калибровки в**.

d Выберите **Трихлорметан**, затем нажмите кнопку **OK**.



После завершения анализа этой серии скопированные отклики соединений будут заменены на отклики из проб трихлорметана в серии.

Задание 6. Преобразование метода сканирования в метод SIM

При использовании данных одноквадрупольного анализа можно создать метод SIM из метода сканирования, изменив один параметр метода и выполнив калибровку таблицы последовательностей, в результате чего будут заменены все коэффициенты отклика для целевых соединений и отношений квалификаторов.

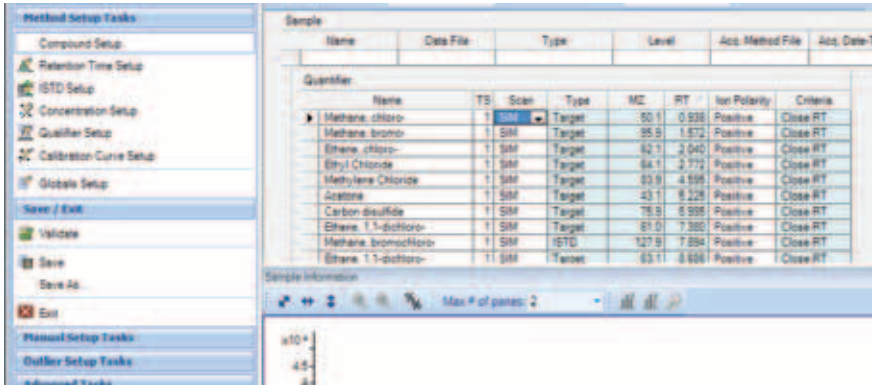
1 Отредактируйте метод.

   a Выберите **Метод > Открыть > Открыть метод из существующего файла**, а затем выберите метод для преобразования. Здесь используется **VoaDemo.M**.

   b В разделе **Задачи отладки метода** нажмите Отладка **соединения**.

   c В столбце **Сканирование** таблицы для первого соединения из раскрывающегося списка выберите **SIM**.

   d Щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Заполнить вниз**, чтобы скопировать **SIM** ко всем соединениям в таблице.



2 Выберите **Метод > Сохранить как** и сохраните этот метод в то же место, которое используется и для сбора данных SIM.

3 Создайте последовательность для замены коэффициентов отклика метода и отношений квалификаторов.

   a Создайте таблицу **Последовательности**, которая выполняет сбор данных SIM для проб уровня калибровки, используемых калибровочной кривой метода количественного анализа.

b Задайте метод для таблицы **Последовательности** как метод сбора данных SIM, который также содержит созданный здесь метод количественного анализа.

c Измените таблицу **Последовательности** таким образом, чтобы выполнялась замена коэффициентов отклика для всех целевых соединений и отношений квалификаторов.

4 Просмотрите калибровочные кривые.

a В программе количественного анализа MassHunter откройте серию и выполните **Анализ** данных калибровки.

b Просмотрите калибровочные кривые посредством помощника аппроксимации калибровочной кривой.

c По завершении просмотра параметров метода сохраните метод количественного анализа в файл сбора данных SIM.

Теперь метод готов к обработке проб сбора данных SIM для этих соединений.

Создание методов SIM

Создание метода количественного анализа SIM выполняется аналогично созданию метода количественного анализа сканирования. Ниже приведен обзор процедур создания метода SIM.

Из собранных данных SIM

В процессе создания метода SIM количественного анализа необходимо выполнить анализ калибровочных проб SIM и получить данные об отклике, необходимые для расчета калибровочных кривых, как описано в **«Задание 4. Добавление калибровочной кривой»** на стр. 33. Это обеспечивает возможность автоматизации процесса. В программе сбора данных MassHunter Data Acquisition метод SIM, созданный в **редакторе методов одноквадрупольной МС**, содержит временные сегменты, m/z иона и, как вариант, название соединения. MassHunter может использовать эти данные, полученные для серии калибровки, для заполнения этих сведений о соединении в количественном методе при выборе **Метод > Создать > Новый метод из полученных данных SIM**. Программа также может использовать все калибровочные пробы в серии для создания таблиц калибровки метода и расчета калибровочных кривых на основе типов кривых по умолчанию. После выполнения этого оставшаяся часть процесса, включающая настройку параметров метода количественного анализа аналогична задачам, представленным в этом упражнении по методу сканирования.

По одному соединению за раз

Процедура добавления одного соединения в метод SIM аналогичная процедуре сканирования, описанной в **«Задание 5. Добавление нового соединения в метод»** на стр. 40.

Из метода SIM

Новые соединения можно добавлять к существующему методу SIM. Для этого создайте метод сбора данных и последовательность, содержащую только новые соединения. Таким образом, будет создана **Таблица серии** в окне Quantitative Analysis, содержащая данные калибровки для новых соединений. Затем воспользуйтесь последовательностью действий **Метод > Присоединить > Присоединить метод из полученных данных SIM**, чтобы автоматизировать процесс добавления новых соединений к существующему методу количественного анализа.

Из метода сканирования

Процедура преобразования метода сканирования в метод SIM была приведена в предыдущем задании **«Задание 6. Преобразование метода сканирования в метод SIM»** на стр. 45.

На этом завершается упражнение по созданию нового метода из собранных данных сканирования. Чтобы получить информацию о просмотре количественных результатов, продолжайте чтение со следующего раздела.

2 Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии 50

Задание 2. Изменение макета главного окна 54

Задание 3. Доступ к параметрам интегрирования 61

Задание 4. Конфигурация параметров в окне «Сведения о соединении» 64

Задание 5. Экспорт результатов в Excel 71

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

В этом упражнении используется серия **VoaSampleData**. Данные расположены на флеш-карте Agilent GC/MS Software Information вместе с руководством по использованию оборудования ГХ-МС 5973/5975 и 5977.

Скопируйте эту папку данных в папку **MassHunter\GCMS\1\data** на своем ПК.

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

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

1 Чтобы запустить программу количественного анализа **Quantitative Analysis**, дважды щелкните значок **MS Quantitative Analysis** на рабочем столе.



2 Щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Восстановить макет по умолчанию**.

3 Щелкните правой кнопкой мыши по заголовку столбца **Проба** в **таблице серии** и выберите **Восстановить макет по умолчанию**.

4 Выберите команду **Открыть серию**  на панели инструментов.

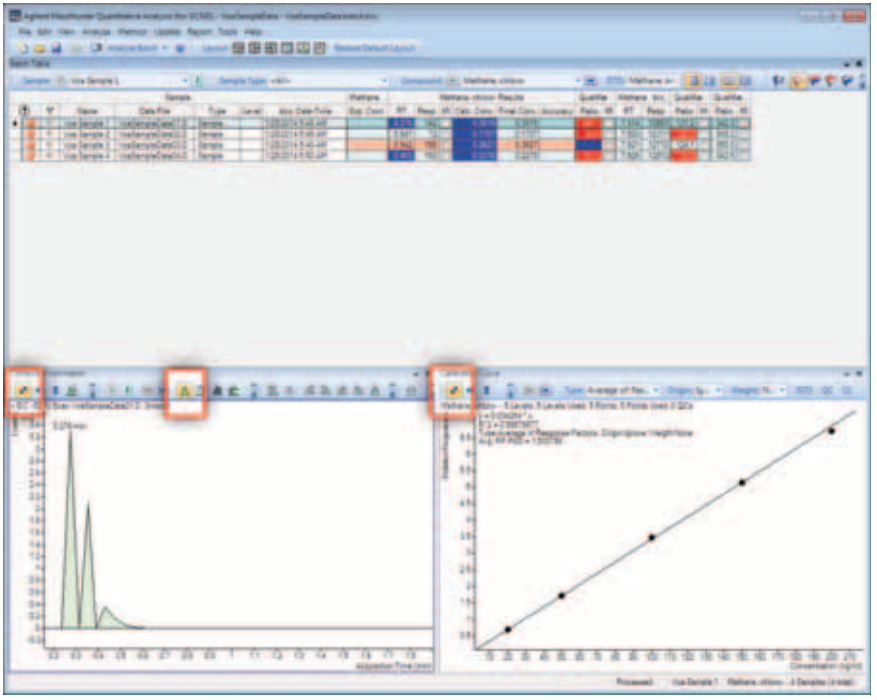
На вкладке **Главная** нажмите кнопку **Открыть серию**.

5 Перейдите к каталогу **MassHunter\GCMS\1\data\VoaSampleData** и дважды щелкните по файлу **VoaSampleData.batch.bin**. Отобразится главное представление, которое должно выглядеть так, как показано ниже. Это макет по умолчанию, который использует параметры по умолчанию для столбцов.

Используемый по умолчанию макет устанавливается на заводе, и его невозможно изменить. Если нужно создать свой собственный макет, см. **«Задание 2. Изменение макета главного окна»** на стр. 54.

6 На панели инструментов **Сведения о соединении** щелкните значки **Вкл/выкл автомасштабирование** и **Показать/скрыть хроматограмму**.

7 На панели инструментов **Калибровочная кривая** щелкните значок **Показать/скрыть хроматограмму**.



8 Выберите **Вид > Сведения о пробе**, чтобы появилась хроматограмма пробы, в настоящий момент выбранной в **таблице серии**. Выбранная проба помечена треугольником с заливкой в дальнем левом столбце таблицы.

На вкладке **Вид** выберите **Панели > Сведения о пробе**.

9 Убедитесь, что **Вкл/выкл автомасштабирование** и **Нормализация каждой** являются единственными значками, выбранными в окне **Сведения о пробе**.

10 Воспользуйтесь значком **Следующая проба** на стандартной панели инструментов **таблицы серии**, чтобы просмотреть хроматограмму каждой пробы.

11 Убедитесь, что соединения одновременно отображаются в **таблице серии**, окне **Сведения о пробе** и окне **Сведения о соединении**.

a Выберите пробу **Voa Sample 3** в **таблице серии**.

b Щелкните правой кнопкой мыши хроматограмму **Сведения о пробе** и выберите **Соединение**. В результате будет выделен пик соединения на хроматограмме соединения, выбранного из **таблицы серии** или окна **Сведения о соединении**.

c Воспользуйтесь значком **Перейти к следующему соединению** на панели инструментов **таблицы серии**, чтобы пройтись по всем калибровочным соединениям, просматривая при этом следующее:

- столбцы результатов соединения в **таблице серии**;
- выделенное расположение соединения в окне **Сведения о соединении**;
- пик соединения в окне **Сведения о соединении**.

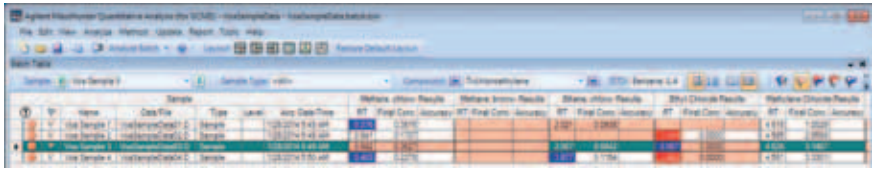
d Воспользуйтесь значком **Перейти к следующему соединению** на панели инструментов **Сведения о соединении**, чтобы пройтись по калибровочным соединениям, как это было сделано в предыдущем шаге.

12 Отобразите результаты для всех калибровочных соединений в **таблице серии**.

a Щелкните значок **В таблице серии отображать несколько соединений/проб** на панели инструментов, чтобы отобразить результаты количественного анализа для всех четырех целевых соединений. Можно также выбрать **Вид > Макет таблицы серии > Просмотр нескольких соединений/проб**.

Во вкладке **Вид** выберите **Макет таблицы серии > Просмотр нескольких соединений/проб**.

b Обратите внимание на различия **ВУ** в окне **Сведения о соединении** для каждого соединения.



c Чтобы вернуться к отображению подробных результатов количественного анализа для выбранного целевого соединения, щелкните значок **Отображать одно соединение/пробу** на панели инструментов.

Во вкладке **Вид** выберите **Макет таблицы серии > Просмотр одного соединения/пробы**.

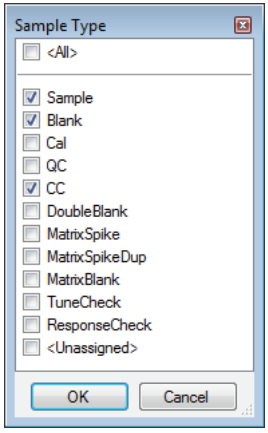
d При необходимости щелкните **Соединение** в раскрывающемся списке и выберите **Кокаин**.

В режимах просмотра **нескольких соединений/проб** и **одного соединения/пробы** отображаются разные наборы столбцов. Если в режиме просмотра **нескольких соединений/проб** добавить столбец в таблицу, то это изменение не произойдет автоматически в режиме **просмотра одного соединения/пробы**.

13 Отфильтруйте пробы, показанные в **таблице серии** по типу пробы.

a Щелкните по раскрывающемуся списку **Тип пробы**. Откроется диалоговое окно **Тип пробы**.

b Снимите флажок в поле **<Все>**, а затем выберите типы проб **Проба**, **Холостая проба** и **CC**.



c Нажмите **OK**, чтобы закрыть диалоговое окно и применить этот фильтр проб.

Таблица серии отображает теперь только типы проб «Проба», «Холостая проба» и «CC». Остальные типы проб, включенные в серию, скрыты.

Задание 2. Изменение макета главного окна

В данном задании показано, как переупорядочить главное окно, используя значки макета панели инструментов, добавить панели квалификатора, спектра и ISTS в окно сведений о соединении, сохранить и извлечь пользовательские макеты для главного окна и экспортировать данные из таблицы серии в файл Excel.

1 С помощью значков макета на панели инструментов расположите **таблицу серии**, окно **Сведения о соединении** и окно **Калибровочная кривая**.

С помощью кнопки **Предустановленные макеты** на вкладке **Вид** расположите **таблицу серии**, окно **Сведения о соединении** и окно **Калибровочная кривая**.

Макет по умолчанию называется **Таблица сверху**, потому что **таблица серии** находится в верхней части главного представления. Измените макет на **Таблица слева**, затем на **Таблица справа**, затем вернитесь к макету **Таблица сверху**.

a На панели инструментов щелкните значок **Макет - таблица слева** .

b На панели инструментов щелкните значок **Макет - таблица справа** .

c На панели инструментов щелкните значок **Макет - таблица сверху** .

2 С помощью значков макета разверните каждое окно по отдельности:

С помощью функции **Развернуть панель** на вкладке **Вид** разверните каждое окно по отдельности.

a На панели инструментов щелкните значок **Развернуть таблицу** .

b На панели инструментов щелкните значок **Развернуть сведения о соединении** .

c На панели инструментов щелкните значок **Развернуть калибровочную кривую** .

d Чтобы вернуться к макету по умолчанию, щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов.

3 Добавьте панели в окно **Сведения о соединении**.

a Выберите **Voa Sample 3** в **таблице серии**.

b В раскрывающемся списке **Соединение** в заголовке **таблицы серии** выберите **Трихлорэтилен**.

c На панели инструментов **Сведения о соединении** щелкните значок **Показать/скрыть квалификаторы** .

d Щелкните значок **Показать/скрыть спектр** .

e Щелкните значок **Показать/скрыть внутренний стандарт** . Макет и результаты будут выглядеть так, как на следующем рисунке.



4 Сохраните используемый по умолчанию макет без калибровочной кривой.

a Закройте окно **Калибровочная кривая**.

b Выберите **Вид > Макет окна > Сохранить макет**.

На вкладке **Вид** выберите **Загрузить/сохранить макет > Сохранить макет**.

c Присвойте файлу макета имя **Таблица серии плюс Сведения о соединении** и нажмите кнопку **Сохранить**.

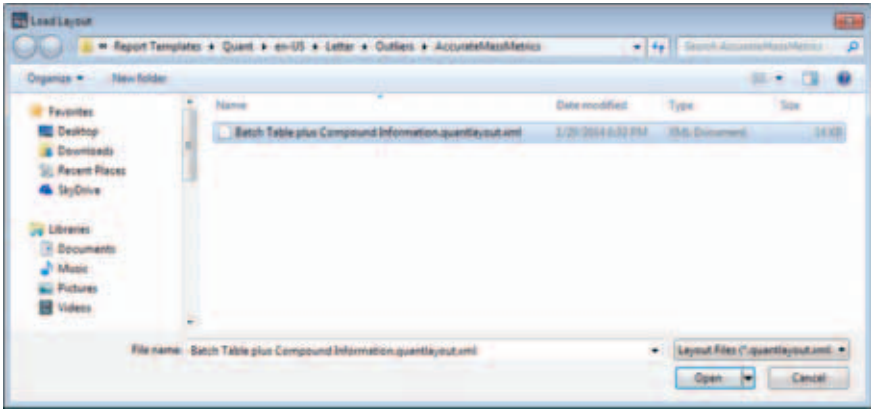
5 Загрузите вновь созданный макет.

a Щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Восстановить макет по умолчанию**.

b Выберите **Вид > Макет окна > Загрузить макет**.

На вкладке **Вид** выберите **Загрузить/сохранить макет > Загрузить макет**.



c Выберите файл **Таблица серии и Сведения о соединении** и нажмите кнопку **Открыть**. Появится макет главного окна без окна **Калибровочная кривая**.



6 Создайте пользовательский макет окна.

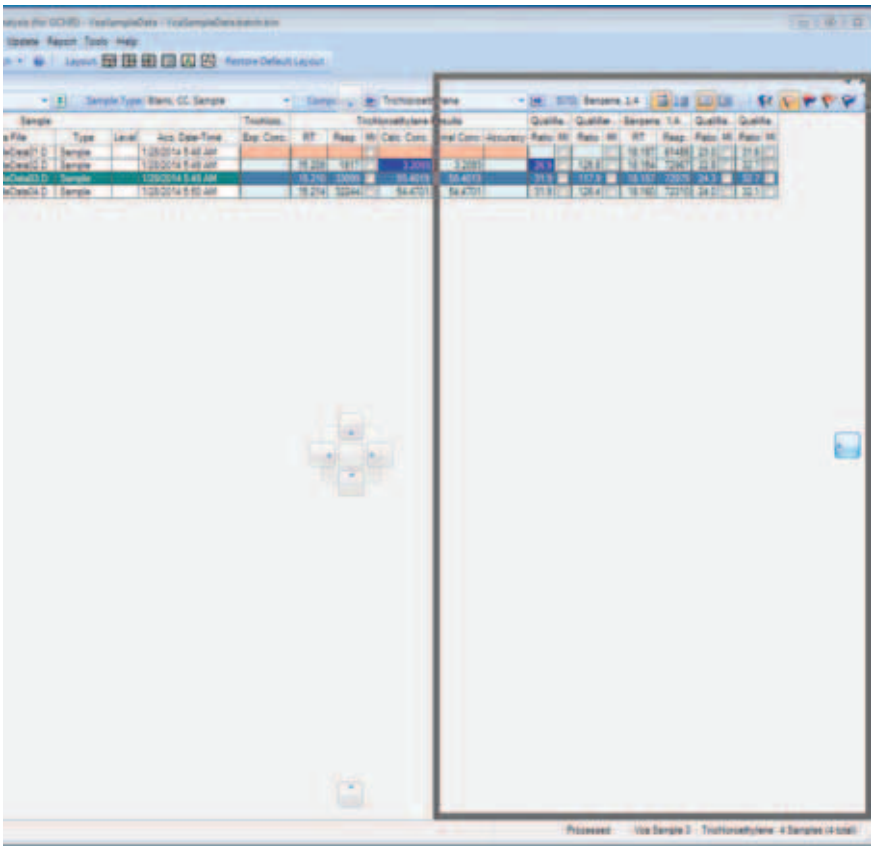
a Щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов главного окна.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Восстановить макет по умолчанию**.

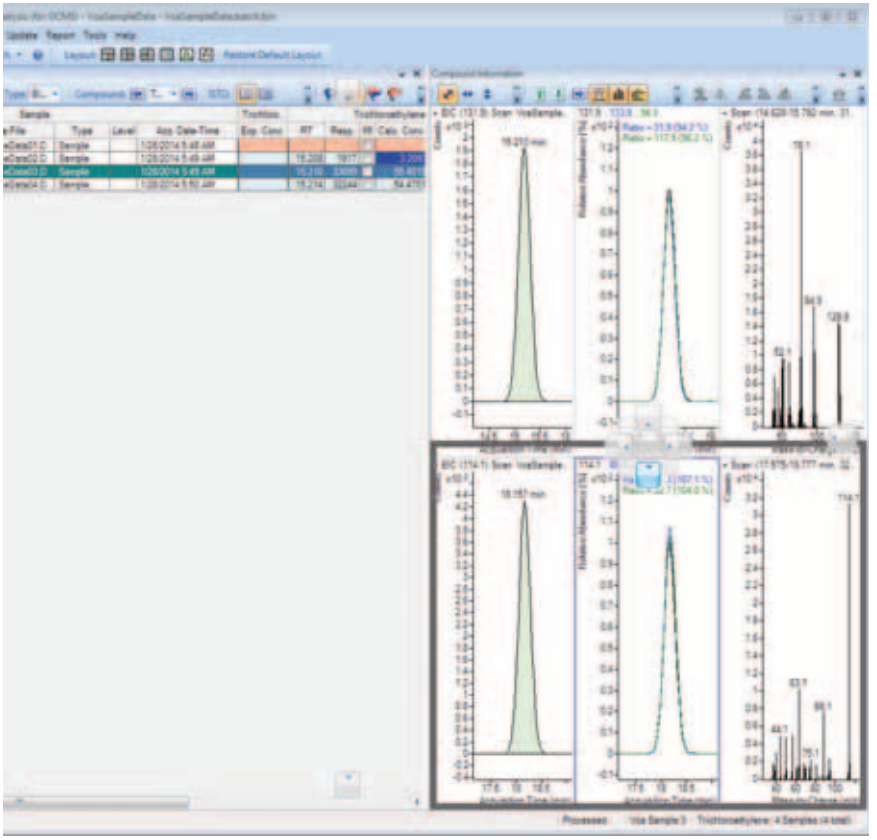
b Для того, чтобы отсоединить окно **Калибровочная кривая** от главного окна, дважды щелкните строку заголовка или щелкните по стрелке вниз рядом со значком закрытия панели и выберите **Плавающее**.

c Для того чтобы отсоединить окно **Сведения о соединении** от главного окна, дважды щелкните строку заголовка или щелкните по стрелке вниз рядом со значком закрытия панели и выберите **Плавающее**.

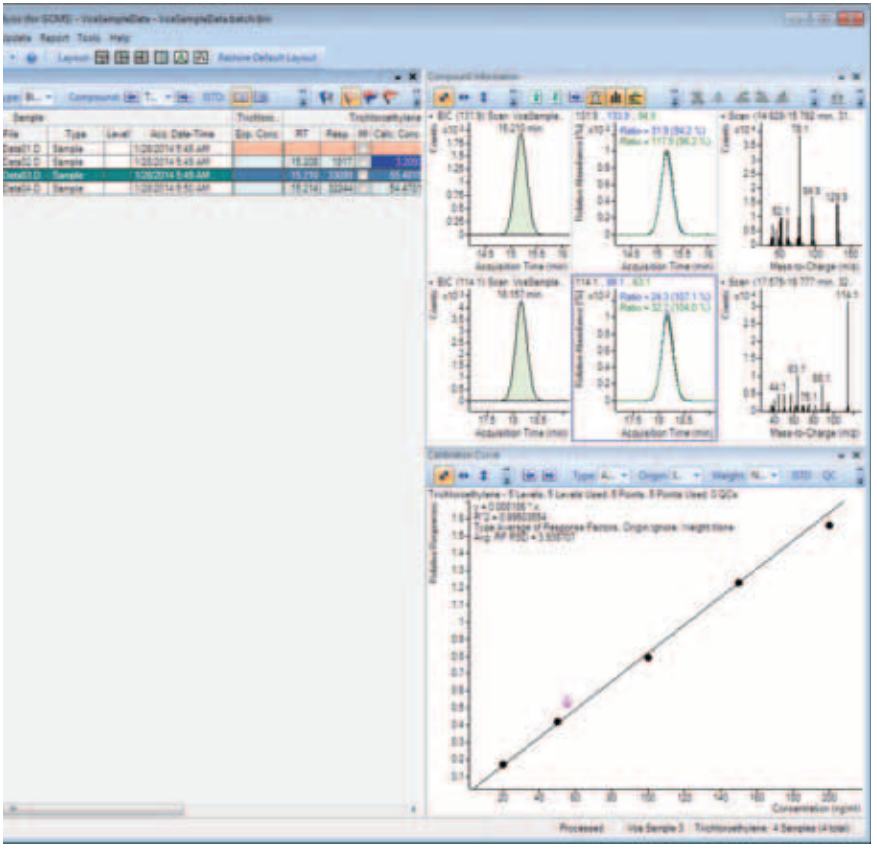
d Перетащите окно **Сведения о соединении** за его строку заголовка в правую часть главного окна. Наведите курсор на правую кнопку закрепления окна и, когда она загорится синим, а контур главного окна будет выглядеть, как показано ниже, отпустите кнопку мыши. Теперь окно **Сведения о соединении** закреплено в правой части главного окна.



e Перетащите окно **Калибровочная кривая** за его строку заголовка в правую часть главного окна. Наведите курсор на центральную нижнюю кнопку закрепления окна и, когда она загорится синим, а контур окна будет выглядеть, как показано ниже, отпустите кнопку мыши. Теперь окно **Калибровочная кривая** закреплено в нижней правой части главного окна.



Пользовательский вид показан на макете ниже.



f Щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов главного окна.

Задание 3. Доступ к параметрам интегрирования

В данном задании показано, как получить доступ к параметрам интегрирования из окна **Сведения о соединении**.

1 Выберите **Файл > Открыть серию** и загрузите файл **VoaSampleData.batch.bin**.

2 Для выполнения этого упражнения настройте окно **Сведения о соединении**.

   a Нажмите **Восстановить макет по умолчанию**.

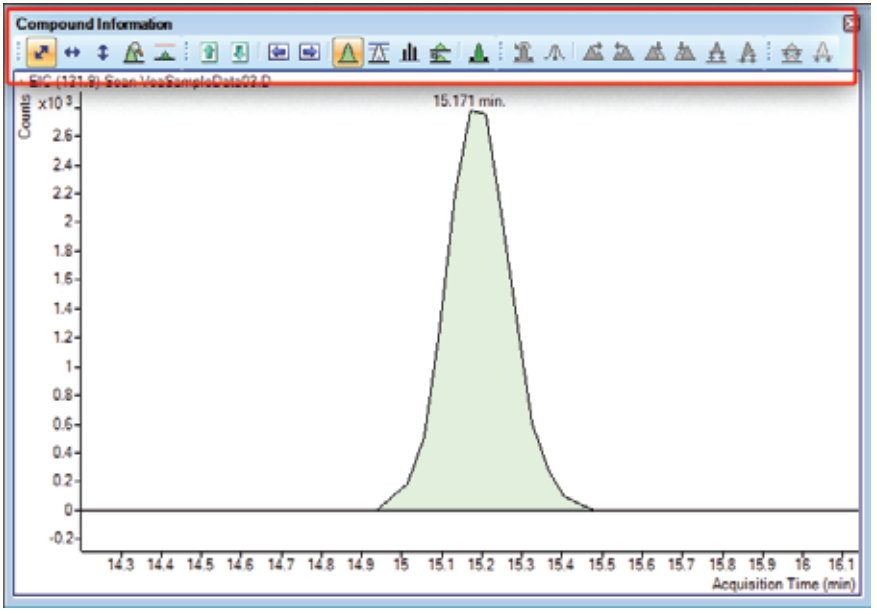
   b Выберите пробу **Voa Sample 3** в **таблице серии**.

   c Выберите соединение **Трихлорэтилен** в **Таблице серии**.

   d Щелкните правой кнопкой мыши в окне **Сведения о соединении**, выберите **Свойства**, а затем нажмите **По умолчанию** в окне **Свойства**.

   e На вкладке **Сведения о соединении (2)** нажмите **По умолчанию**, а затем нажмите **OK**.

f Наведите курсор на границу между окном **Сведения о соединении** и окном **Калибровочная кривая**, а затем тащите границу вправо до тех пор, пока все значки не будут отображены в окне **Сведения о соединении**, как показано ниже.

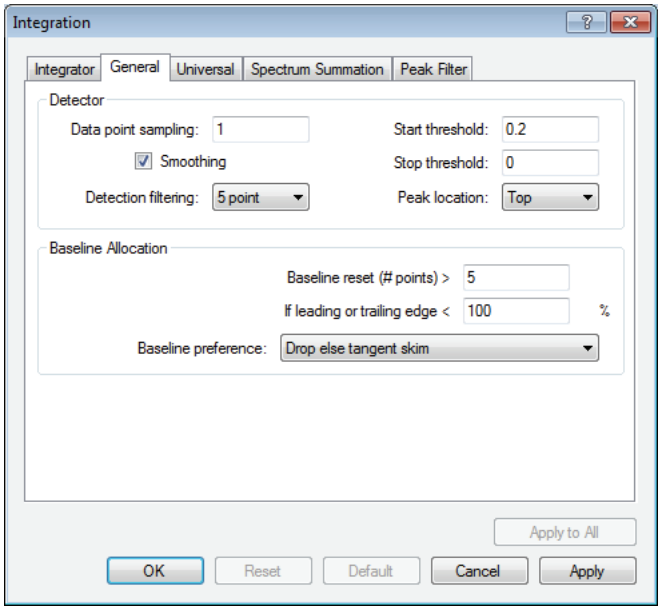


3 Перейдите к настройкам параметра интегрирования для отображенного соединения.

a Щелкните правой кнопкой мыши в окне **Сведения о соединении**, выберите **Параметры интегрирования**.

b Щелкните по вкладке **Общий** для отображения параметров для интегратора **Общий**.

c При создании этого метода интегратор **Общий** был задан для всех соединений. Воспользуйтесь этим диалоговым окном для изменения настроек интегратора для выбранного соединения.



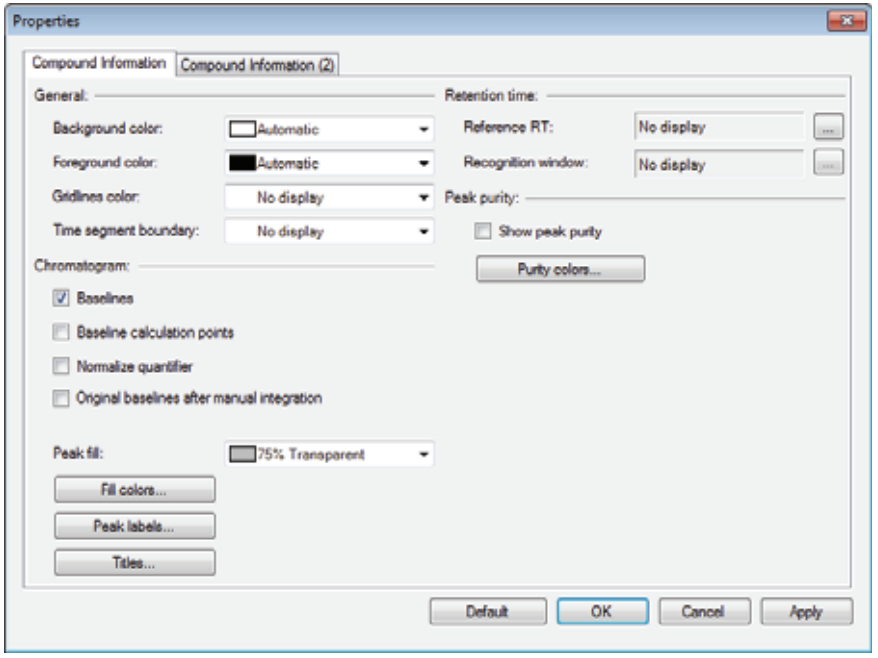
d Нажмите кнопку **OK**, чтобы закрыть диалоговое окно.

Задание 4. Конфигурация параметров в окне «Сведения о соединении»

В данном задании показано, как задать окно **Сведения о соединении** для просмотра результатов интегрирования. Предполагается, что значения по умолчанию были заданы в предыдущем задании.

1 Щелкните правой кнопкой мыши окно **Сведения о соединении** и выберите **Свойства**.

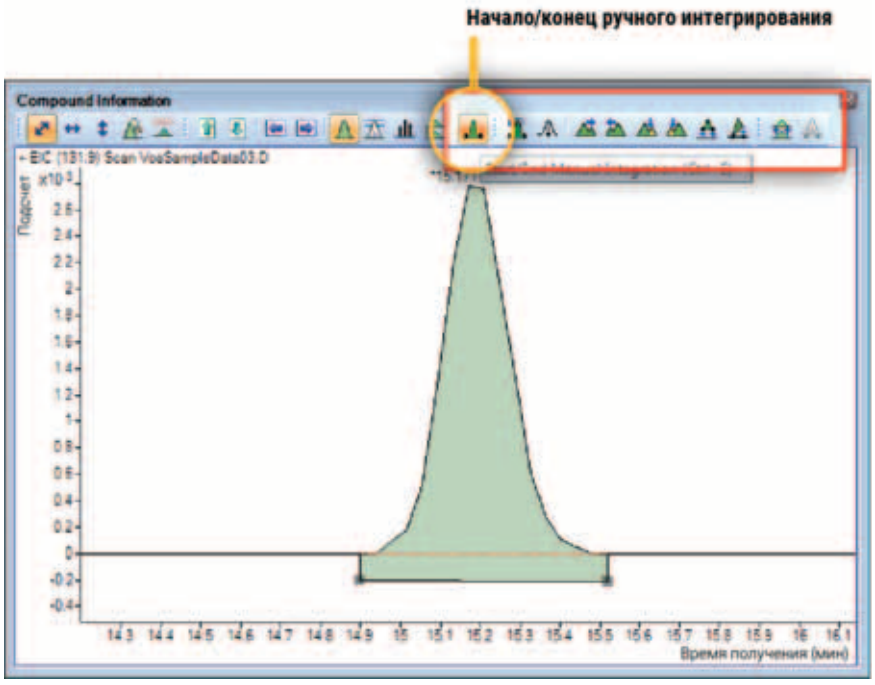
Обратите внимание, что параметр **Базовые линии** является выбранным параметром по умолчанию. Он отображает базовую линию для пика в окне **Сведения о соединении**.



2 Выберите **Исходные базовые линии после ручного интегрирования** и нажмите **OK**.

3 На панели инструментов **Сведения о соединении** выберите значок **Начало/конец ручного интегрирования**. Обратите внимание, что теперь активны значки справа от этого значка. Наведите мышь на значки, чтобы просмотреть их названия.

4 Протащите конечные точки базовой линии немного вниз и обратите внимание на красную пунктирную линию. Это траектория исходной базовой линии, активированной нами ранее.



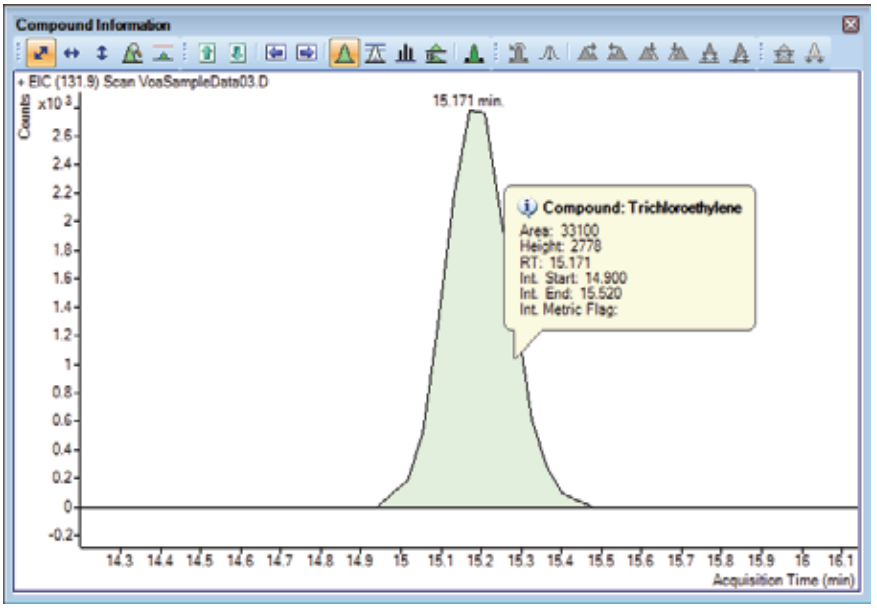
5 Щелкните значок **Очистить ручное интегрирование**. Обратите внимание на то, что изменения, внесенные в конечные точки, теперь удалены.

6 Щелкните значок **Обнулить пик**. Обратите внимание, что базовая линия стала единой вертикальной линией без площади, а пик удалился. Здесь красная пунктирная линия вновь демонстрирует исходное расположение базовой линии.

7 Щелкните значки **Очистить ручное интегрирование** и **Начало/конец ручного интегрирования**, чтобы восстановить исходный пик.

8 Пометьте хроматограмму.

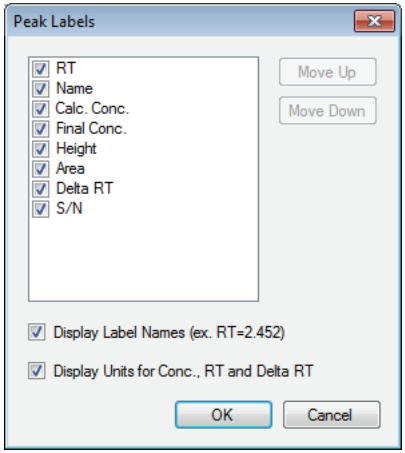
a Наведите мышь на пик, чтобы отобразить сведения о пике, как показано ниже. Вам может потребоваться, чтобы эти сведения или их часть отображались постоянно, как описано ниже.



b Щелкните правой кнопкой мыши окно **Сведения о соединении** и выберите **Свойства**.

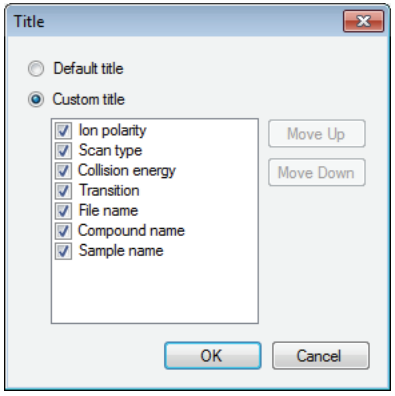
c В области **Заливка пика** нажмите **Метки пиков**. Выбранные здесь метки появятся над пиком.

d Поставьте флажки напротив каждой метки и функции в этом диалоговом окне и нажмите **OK**.

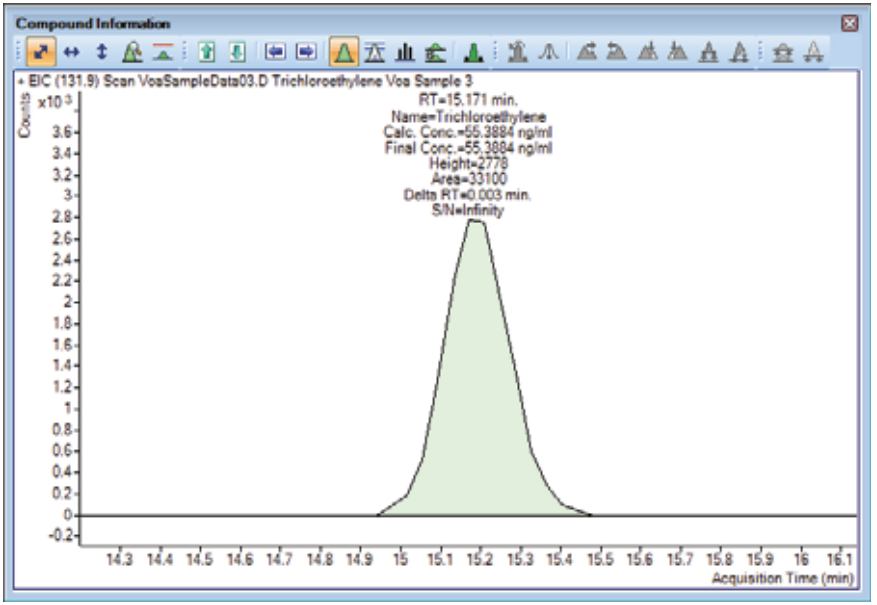


e В области **Заливка пика** нажмите **Заголовки**. Выбранный здесь заголовок появится в правой верхней части хроматограммы.

f Выберите **Пользовательский заголовок**, а затем выберите все метки в этом окне.



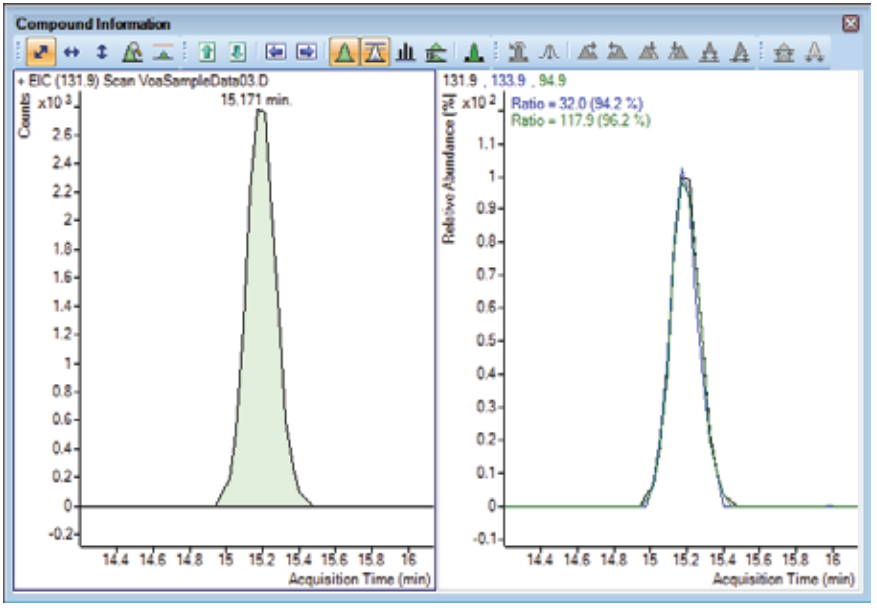
g Нажмите кнопку **OK**, затем щелкните **Применить**. Обратите внимание на пересмотренный заголовок и новые метки пиков.



h Нажмите **По умолчанию**, чтобы вернуть параметры к виду по умолчанию, затем нажмите **OK**.

9 Задайте отображение пиков квалификатора.

a Нажмите **Показать/скрыть квалификаторы**, чтобы отобразить пик квалификаторов справа от пика целевого соединения.



b Щелкните правой кнопкой мыши окно «Сведения о соединении» и выберите **Свойства**.

c Перейдите на вкладку **Сведения о соединении (2)**. В области **Квалификаторы** снимите флажок **Нормализовать квалификаторы**.

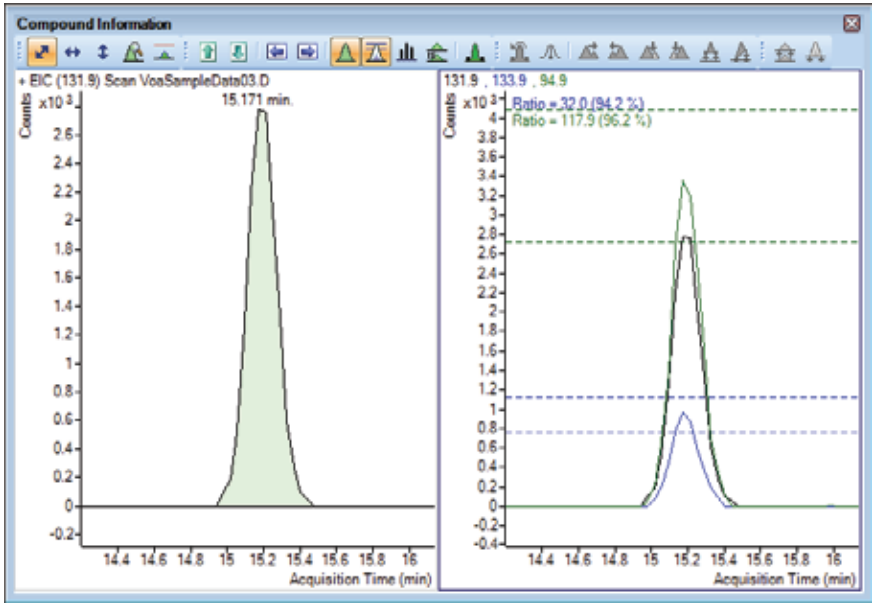
d Нажмите **Применить** и посмотрите на два пика квалификатора. Пик квалификатора с примечанием синего цвета имеет значение m/z 133,9. Пик квалификатора с примечанием зеленого цвета имеет значение m/z 94,9. Чтобы узнать, как были заданы эти цвета, нажмите **Цвета квалификаторов** и обратите внимание на порядок цветов квалификаторов: синий, зеленый, а затем коричневый.

e Нажмите **Отмена**, чтобы закрыть диалоговое окно **Цвета квалификаторов**.

f Выберите пунктирную линию из раскрывающегося списка **Интервал неопределенности**.

Обратите внимание, что квалификатор зеленого цвета имеет интервал неопределенности зеленого цвета, демонстрирующий полосу 96,2 % от ожидаемого. Аналогично квалификатор синего цвета демонстрирует полосу 94,2 % от ожидаемого. Это значение по умолчанию метки отношения откликов и цвета «отношения и процента ожидаемого отношения».

Также обратите внимание, что установкой квалификатора по умолчанию для команды **Залить пики** является «Заливка за пределами пиков квалификатора».



g Нажмите **OK**, чтобы принять эти настройки для окна **Сведения о соединении**.

Задание 5. Экспорт результатов в Excel

1 Чтобы активировать окно **Таблица серии**, щелкните его строку заголовка.

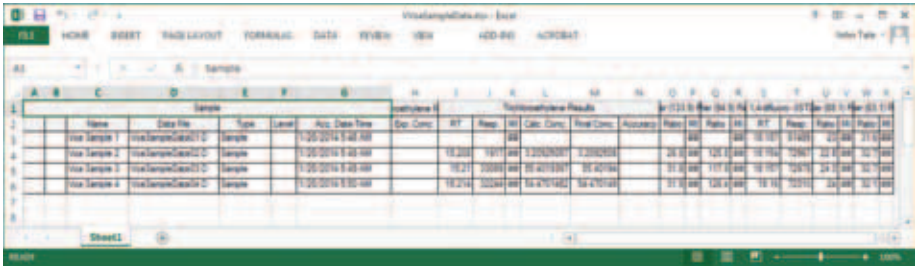
2 Выберите **Файл > Экспорт > Экспорт таблицы**.

Щелкните правой кнопкой мыши в области **Таблица серии** и выберите **Экспорт таблицы**,

3 В качестве каталога назначения выберите **Документы**, а в поле «Сохранить как тип» — **Файлы Excel (*.xlsx)**.

4 Для файла экспорта введите имя **VoaSampleDataBatch**.

5 Нажмите кнопку **Сохранить**. Откроется файл Excel.



3 Соединения навскидку

Задание 1. Просмотр окна «Соединения навскидку» 73

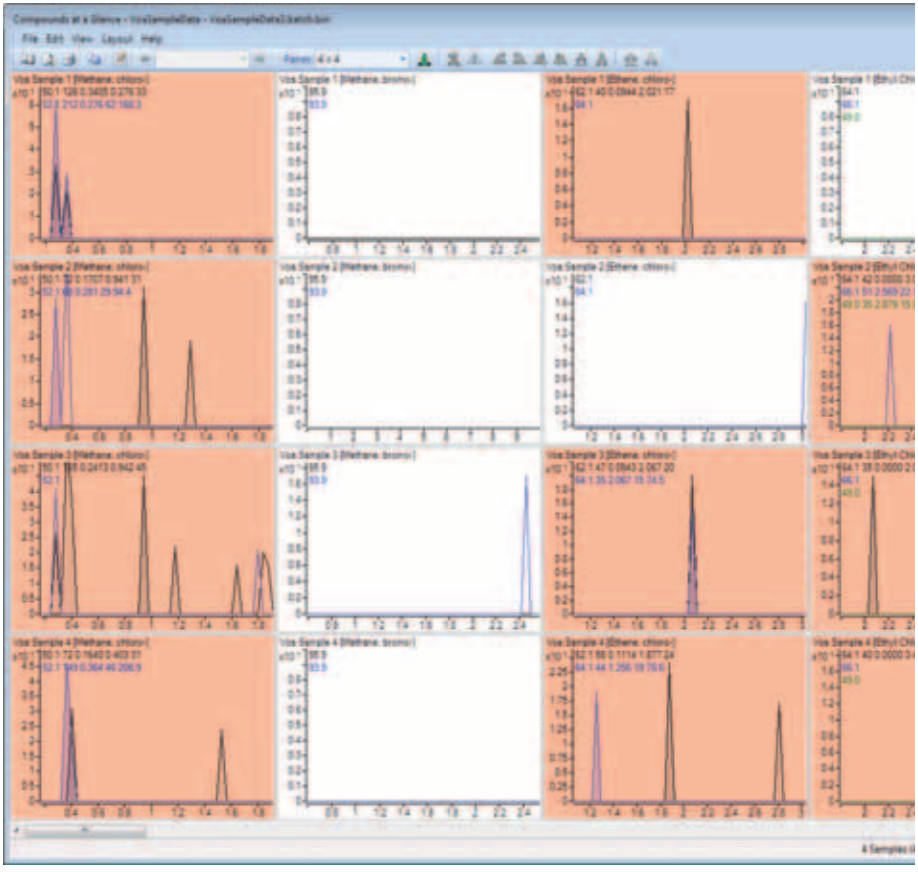
Задание 2. Отображение свойств в окне «Соединения навскидку» 85

Задание 1. Просмотр окна «Соединения навскидку»

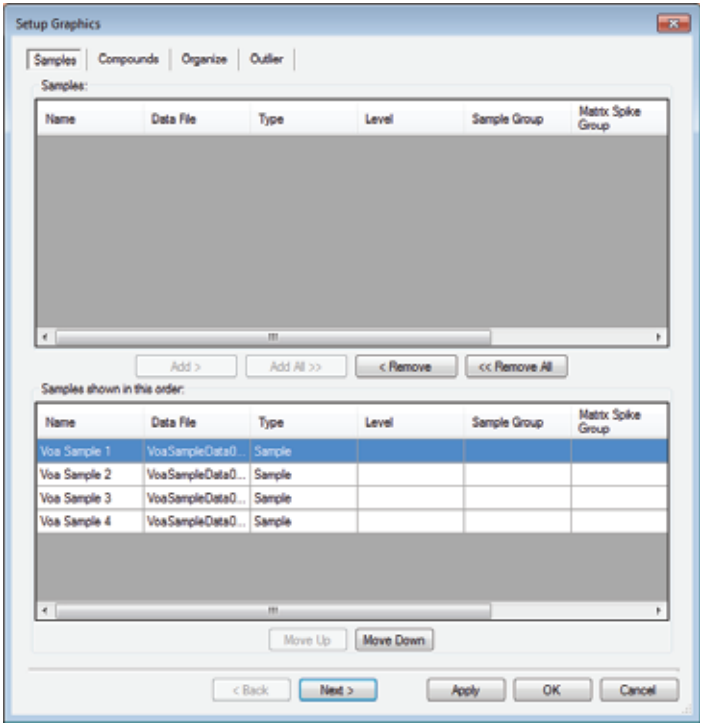
В окне **Соединения навскидку** можно просмотреть все или выбранные хроматограммы соединений серии, находя их по названию соединения или по пробе. На пик соединения могут быть наложены квалификаторы, внутренние стандарты, добавка матрицы, все соединения или группы соединений, а также все пробы или группы проб. Находясь в этом окне, можно вручную интегрировать все соединения. Также для каждого пика соединения могут определяться заданные в конфигурации результаты по выбросам.

1 Выберите **Файл > Открыть серию** и загрузите файл **VoaSampleData.batch.bin**.

2 Выберите пункты **Просмотр > Соединения навскидку**. По умолчанию используются последние заданные параметры макета окна.

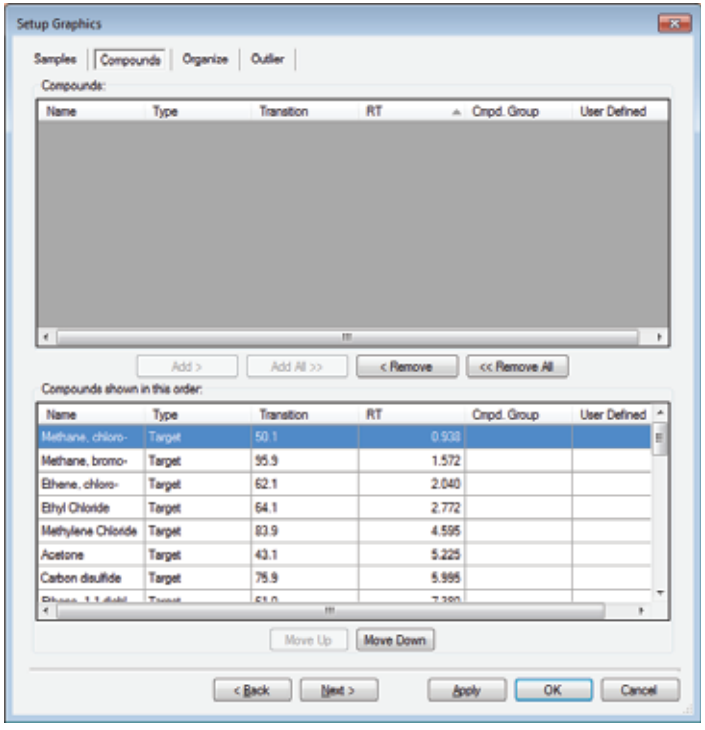


3 Щелкните значок Отладка **макета** , чтобы открыть вкладку **Пробы** в окне **Отладка графиков**.



4 Упорядочите рабочий стол таким образом, чтобы были видны оба окна — **Соединения навскидку** и **Отладка графиков**.

5 На нижней панели окна **Отладка графиков** выберите пробы, которые нужно удалить из окна **Соединения навскидку**, и нажмите кнопку **Удалить**. В данном примере мы используем все четыре пробы, поэтому их не нужно удалять на нижней панели.



6 Нажмите кнопку **Далее**, чтобы отобразить вкладку **Соединения**.

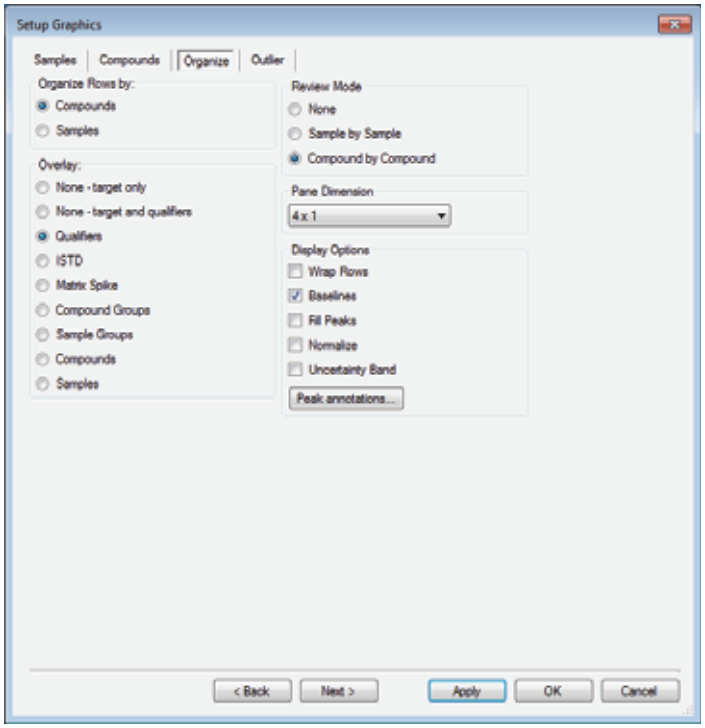
7 На нижней панели окна **Отладка графиков** выберите соединения, которые нужно удалить из окна **Соединения навскидку**, и нажмите кнопку **Удалить**. В данном примере мы изучаем все соединения, поэтому их не нужно удалять на нижней панели.

8 Нажмите кнопку **Далее**, чтобы отобразить вкладку **Упорядочить**.

9 В области **Упорядочить строки по** выберите вариант **Соединения**. Нажмите кнопку **Применить**, чтобы увидеть изменения в окне **Соединения навскидку**.

Теперь в каждом столбце отображается одна проба, а в каждой строке — выбранное соединение, найденное во всех четырех пробах.

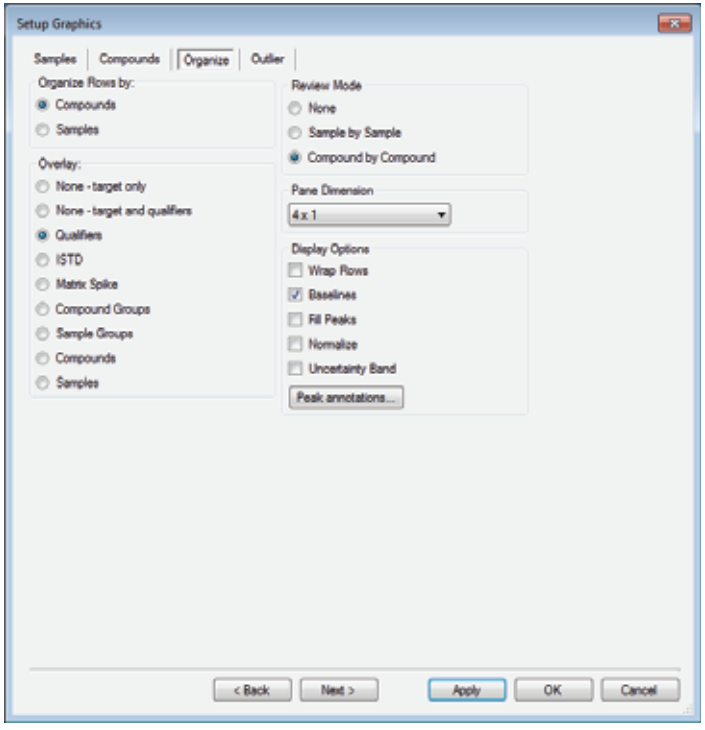
10 В области **Режим просмотра** выберите элемент **Соединения одно за другим**. Нажмите кнопку **Применить**, чтобы увидеть изменения в окне **Соединения навскидку**.



После этого на панели инструментов окна **Соединения навскидку** станет доступным режим просмотра. Так как ранее было выбрано **Упорядочение строк по пробам**, в этом режиме просмотра в столбце отображается одно соединение, а в каждой строке столбца указывается результат этого соединения в содержащей его пробе.

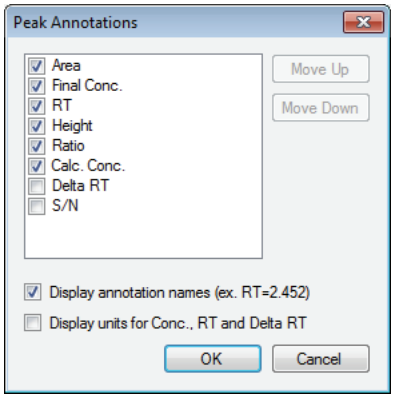
11 В области **Размер панели** выберите раскрывающийся список и наводите курсор мыши на квадраты, пока на панели не отобразится **4X1**. Нажмите **Применить**.

В окне будут показаны результаты выбранного соединения во всех 4 пробах, содержащих одно соединение.



12 В области **Параметры отображения** выберите **Базовые линии**. Нажмите кнопку **Применить**, чтобы увидеть изменения в окне **Соединения навскидку**.

13 В области **Параметры отображения** выберите **Подписи к пикам**. Нажмите кнопку **Применить**, чтобы увидеть изменения в окне **Соединения навскидку**.

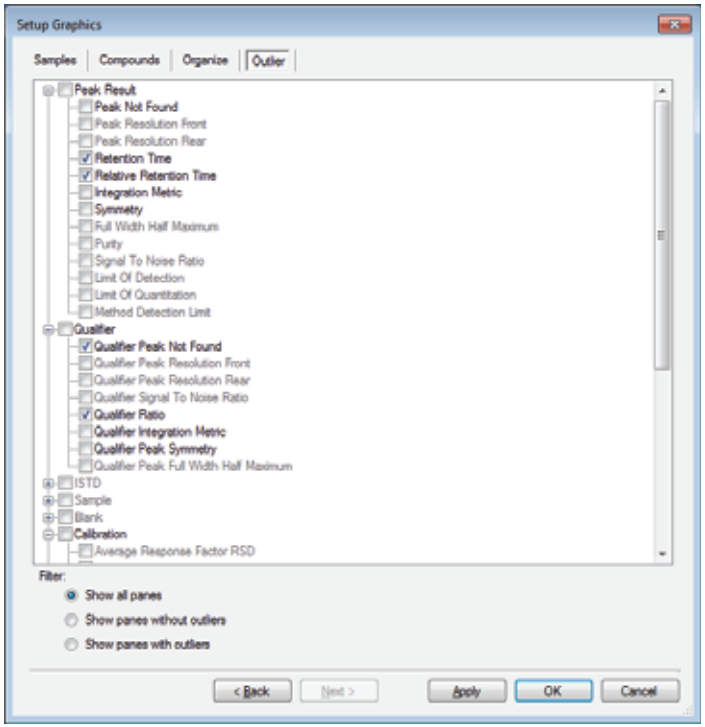


14 Нажмите кнопку **Далее**, чтобы отобразить вкладку **Выброс**.

15 Выберите пункты, показанные в примере ниже.

- **Результаты пика** - **Время удерживания** и **Относительное время удерживания**
- **Квалификатор** - **Пик квалификатора не найден** и **Отношение квалификатора**

- **Калибровка** - **Диапазон калибровки**



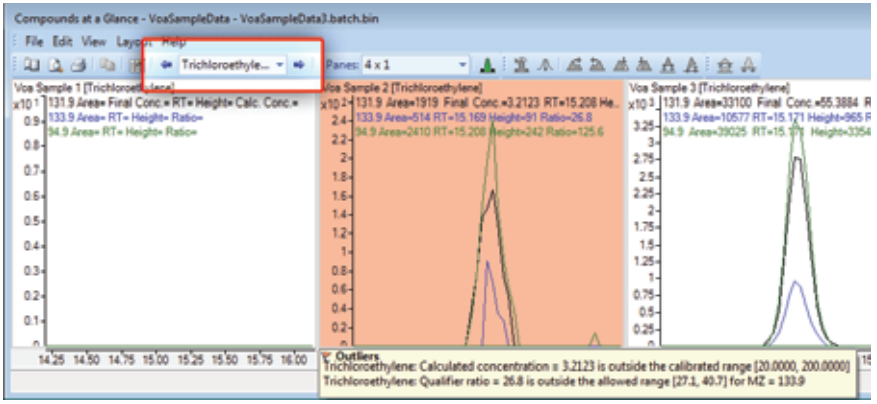
16 Нажмите кнопку **OK**, чтобы закрыть окно **Отладка графиков**, и обратите внимание на выделенную панель в окне **Соединения навскидку**.

Подробные сведения об этих параметрах см. в разделе **«Задание 1. Просмотр выбросов»** на стр. 90.

17 В окне **Соединения навскидку** выберите соединение **Трихлорэтилен** в раскрывающемся списке **Обзор**.

18 Наведите курсор мыши на оранжево-розовую панель в окне **Соединения навскидку**, чтобы увидеть сообщения о выбросах, относящиеся к результатам анализа.

Здесь указано, что рассчитанная концентрация находится вне диапазона калибровки, и отношение квалификатора — также вне допустимого диапазона.

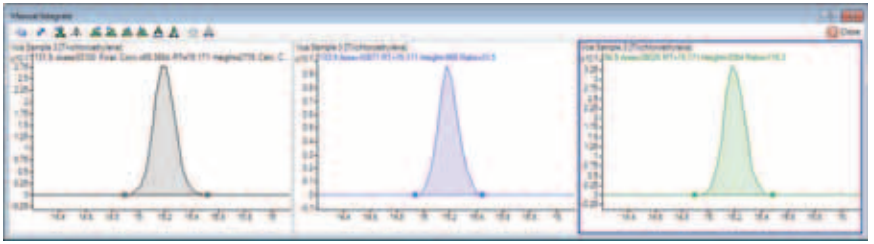


19 Просмотрите, как работает функция **Привязать все оси X**.

a Щелкните правой кнопкой мыши на любой панели и выберите пункт **Привязать все оси X**.

b Чтобы посмотреть, как работает функция **Привязать все оси X**, щелкните левой кнопкой и перетаскивайте шкалу ВУ, наблюдая за перемещением пиков по всем панелям. Увеличьте масштаб на каком-нибудь участке одной хроматограммы, и тот же участок будет увеличен на других хроматограммах.

20 Дважды щелкните на панели **Проба Voa 3**, чтобы открыть окно **Интегрирование вручную** с тремя областями. Первая область — целевая, в остальных двух показаны соответствующие квалификаторы.



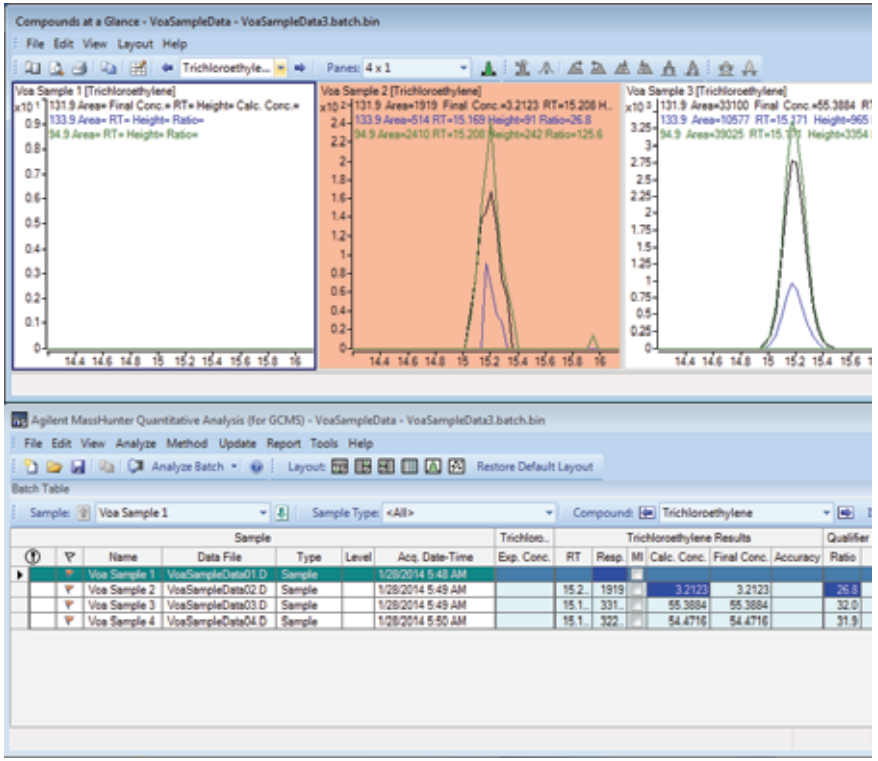
21 Закройте окно **Интегрирование вручную** и просмотрите оставшиеся соединения, выбрав стрелку **Далее** или **Назад** возле параметра **Обзор** с названием просматриваемого соединения.

22 По завершении можно распечатать окно **Соединения навскидку**. Для установки свойств страницы используйте окно **Параметры страницы**.

23 Синхронизируйте пробу с соединениями в **таблице серии** с помощью окна **Соединения навскидку**.

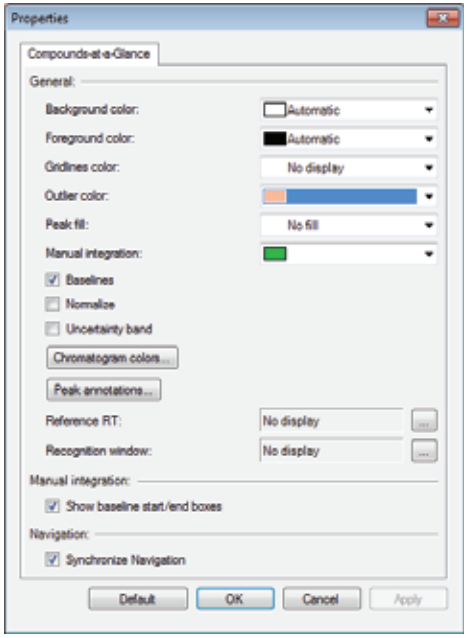
a Для этой процедуры используйте окно **Соединения навскидку** из предыдущих шагов.

b Установите одинаковую ширину окон **Соединения навскидку** и **Количественный анализ** и разместите их вертикально, как показано ниже.

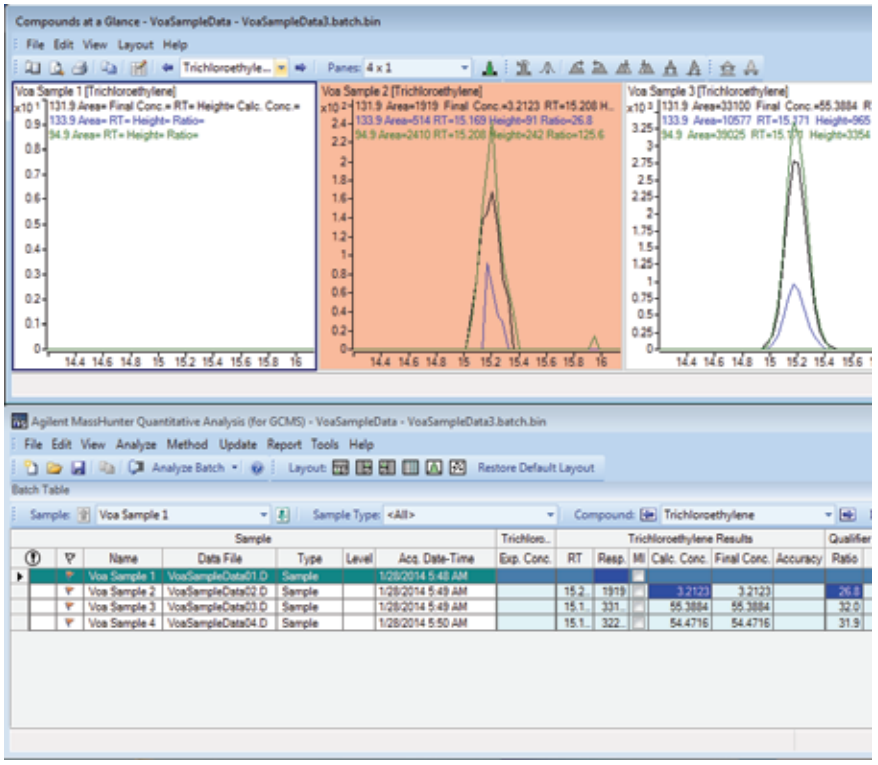


c Щелкните правой кнопкой мыши окно **Соединения навскидку** и выберите пункт **Свойства**.

d В разделе **Навигация** выберите **Синхронная навигация** и нажмите **ОК**, чтобы закрыть диалоговое окно.



e Выберите соединение в **таблице серии**, и такое же соединение будет выбрано в окне **Соединения навскидку**. Выбор соединения в окне **Соединения навскидку** влияет на выбор в **таблице серии**.

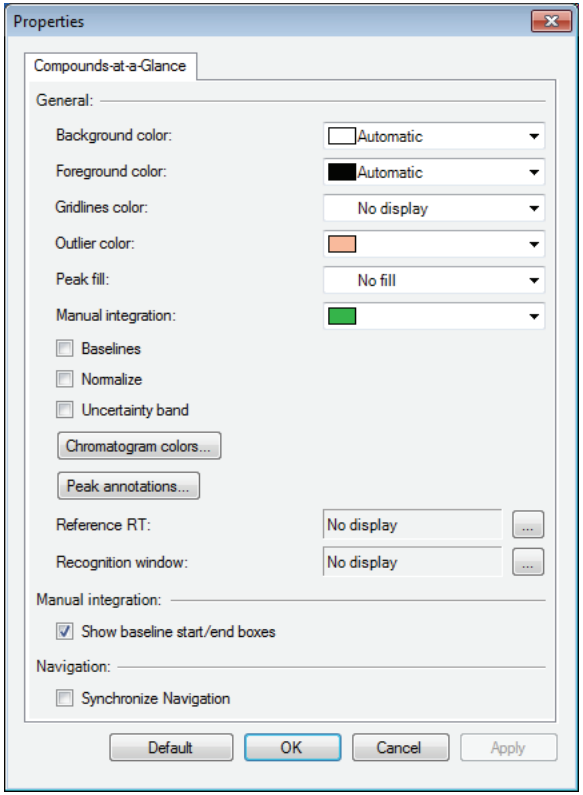


Задание 2. Отображение свойств в окне «Соединения навскидку»

В этом задании показано, как задать надписи и цвета в окне **Соединения навскидку** для просмотра результатов. Предполагается, в что предыдущем шаге это окно уже было настроено.

1 Щелкните правой кнопкой мыши окно **Соединения навскидку** и выберите пункт **Свойства**.

2 Щелкните пункт **По умолчанию**, чтобы восстановить стандартные значения для свойств.



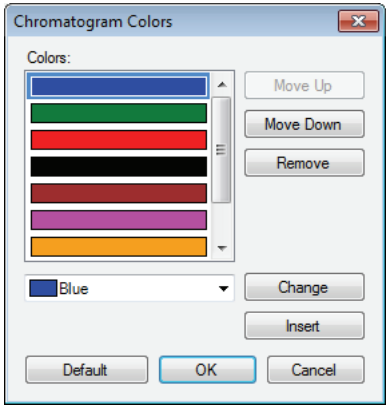
Обратите внимание: в разделе **Интегрирование вручную** выбран пункт **Показывать поля начала/окончания базовой линии**. Он отображается только при включенной функции интегрирования вручную.

Стандартный цвет для выброса — оранжево-розовый. Если для соединения в пробе есть выброс, фон такой хроматограммы будет оранжево-розовым.

3 В разделе **Общие** выберите пункт **Интервал неопределенности**.

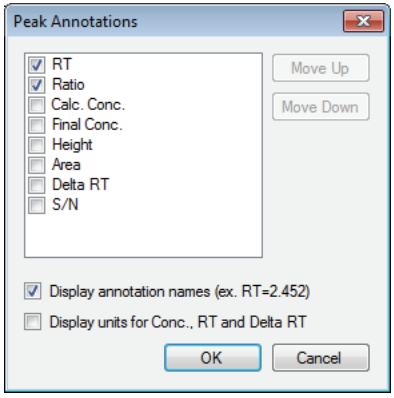
4 Нажмите кнопку **Цвета хроматограммы** и просмотрите стандартный порядок цветов — черный, синий, зеленый и т. д.

5 Когда сверху будет показан выбранный черный цвет, нажмите кнопку **Вниз**, чтобы установить такой порядок: синий, зеленый, красный (как показано ниже).

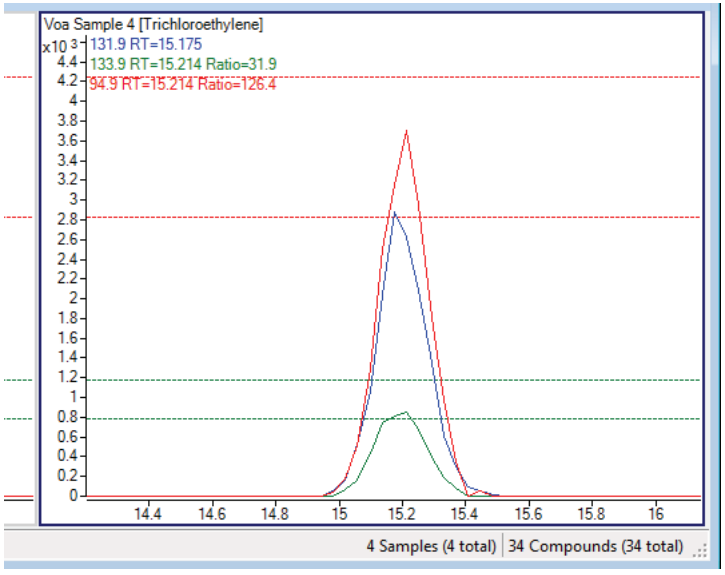


На основе этих настроек пик целевого соединения и надписи будут показаны синим, первый пик квалификатора, надписи и диапазон неопределенности — зеленым, а второй пик квалификатора, надписи и диапазон неопределенности — красным. Нажмите кнопку **OK**.

6 Нажмите кнопку **Подписи к пикам** и выберите **ВУ** и **Отношение**, как показано ниже. Нажмите кнопку **OK**.



7 Нажмите кнопку **OK**, чтобы закрыть окно **Свойства**, и просмотрите внесенные изменения. Целевой пик и надпись для него показаны синим согласно настройкам.



Для зеленого квалификатора таким же цветом показан диапазон неопределенности и отношение 31,9, едва попадающее в диапазон.

Для красного квалификатора показано отношение 126,4, доходящее прямо до центра диапазона.

Надписи, обозначающие **ВУ** и **отношение**, показаны тем же цветом, что и соответствующие им пики.

4 Выбросы и сообщения о количественном анализе

Задание 1. Просмотр выбросов 90

Задание 2. Просмотр сообщений количественного анализа 95

Задание 3. Отладка выбросов 97

В данном упражнении вы узнаете, как просматривать результаты серии с помощью индикаторов **таблицы серии «Выбросы»** и компонентов **Сообщение о количественном анализе**. Вы также просмотрите параметры выбросов для окна **Соединения навскидку**.

Выбросы позволяют задавать диапазоны параметров, представляющие допустимые результаты. Результаты за пределами этих допустимых параметров называются выбросами. Программа MassHunter выполняет мониторинг выбросов, обнаруженных в соединениях, присутствующих в каждой пробе. Затем она дает графическое представление результатов с цветовой маркировкой в таблицах.

Задание 1. Просмотр выбросов

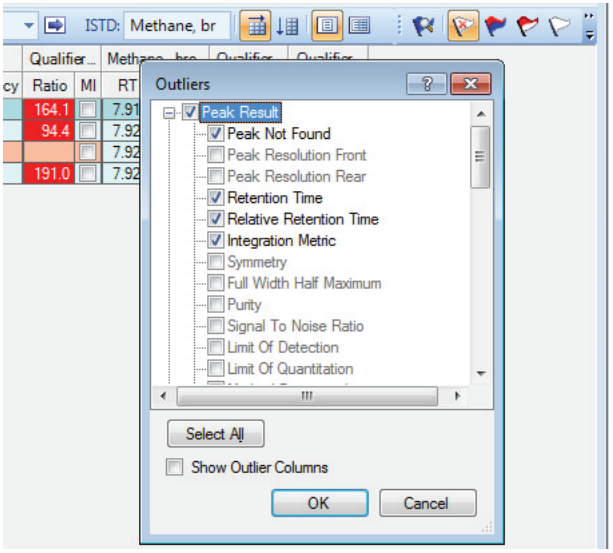
В данном задании показывается, как выбросы отображаются для соединения в **таблице серии** и как можно фильтровать результаты с метками выбросов. В этом примере мы устанавливаем этот фильтр только для того, чтобы отобразить выбросы, задаваемые программой MassHunter по умолчанию.

1 Выполните инициализацию выбросов по умолчанию.

a Выберите **Файл > Открыть серию**, затем перейдите к файлу серии **VoaSampleData** и откройте его.

b Щелкните значок **Выбор выбросов** , чтобы открыть диалоговое окно **Выбросы**. В диалоговом окне **Выбросы** выберите только выбросы по умолчанию, те, которые выделены жирным шрифтом, в группах **Результаты по пику**, **Квалификатор** и **Калибровка**.

Здесь параметры фильтра применимы только к **таблице серии** и недействительны для окна **Соединения навскидку**.



c Нажмите **OK**, чтобы активировать отображение выбросов по умолчанию.

2 Просмотрите выбросы, представленные в **таблице серии**.

a Нажмите **Анализировать серию** на панели инструментов главного окна. Будут обнаружены и показаны выбросы для серии.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Анализировать серию**.

b Щелкните значок **Выключить фильтр выбросов** , если он еще не выбран, чтобы отобразить все пробы.

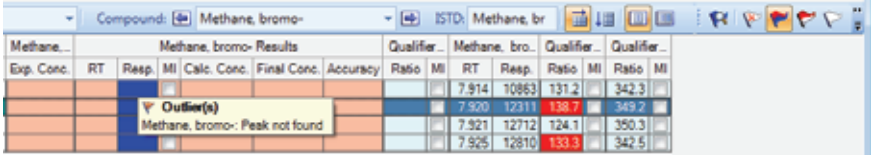
c Выберите **хлорметан** в **таблице серии** и обратите внимание на наличие выбросов, отмеченных ячейками с красной и синей заливкой.

d Щелкните значок **Показать строки без выбросов** . Будут скрыты все пробы, так как хлорметан имеет выбросы во всех 4 пробах.

e Щелкните значок **Показать строки с высокими/низкими выбросами** , чтобы вновь отобразить все 4 пробы.

f Щелкните значок **Следующее соединение**  на панели инструментов **Таблица серии** для просмотра результатов для бромметана. Выделение светло-оранжевым в областях **Метод** и **Результаты** указывает на то, что целевое соединение не было обнаружено. Для всех четырех соединений присутствуют выбросы, на что указывает столбец **Откл.** целевого соединения.

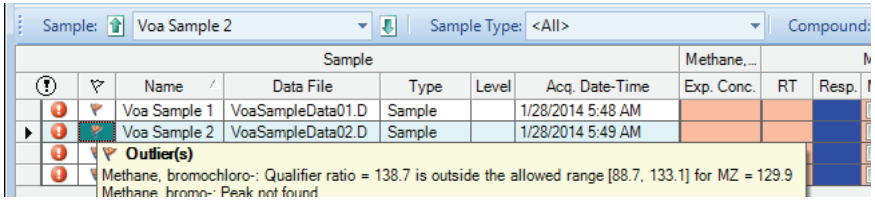
g Наведите мышь на синюю ячейку, чтобы появилось сообщение о выбросах.



Для соединения, выбранного в качестве **Voa Sample 2**, имеется несколько выбросов: одна ячейка с синей заливкой в области **Результат** целевых соединений и одна ячейка с красной заливкой в столбце **Отношение** второго квалификатора.

Просмотрите сообщение о выбросах в залитой красным ячейке этой пробы. Ячейка залита красным, потому что обнаруженное значение отношения составляет 138,7, что больше, чем максимальное значение 133,1, допустимое в этом диапазоне. Если бы его значение было ниже, чем самое низкое значение 88,7, допустимое в этом диапазоне, то оно было бы выделено синим.

h Наведите мышь на значок **Выброс — Сводка** (флажок с красной заливкой), чтобы появились сообщения о выбросах. Обратите внимание, что в предыдущем шаге было два выброса в двух различных ячейках. Здесь они суммированы.



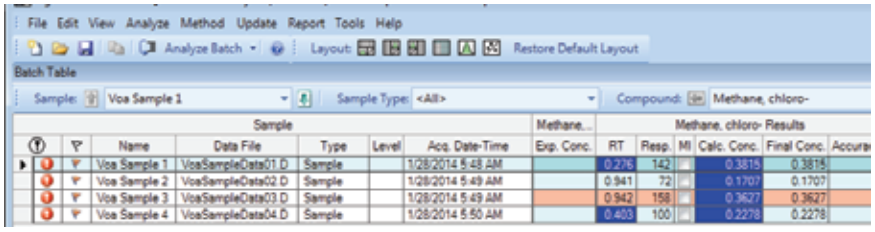
3 Щелкните значок **Выбор выбросов** .

4 В области **Результаты по пику** снимите флажок в поле **Пик не найден**.

Теперь, когда **Пик не найден** не является больше выбросом, в **таблице серии** содержатся только две пробы. Это связано с тем, что фильтр выбросов настроен только на то, чтобы показывать только пробы с выбросами для текущего соединения. Эти выбросы не имеют ценности, поскольку отношение квалификатора к целевому соединению не существует без целевого соединения.

5 Щелкните значок **Выключить фильтр выбросов** , чтобы отобразить все пробы.

6 Несколько раз щелкните значок **Следующее соединение** на панели инструментов **таблицы серии**, чтобы просмотреть результаты для каждого калибровочного соединения во всех четырех пробах.



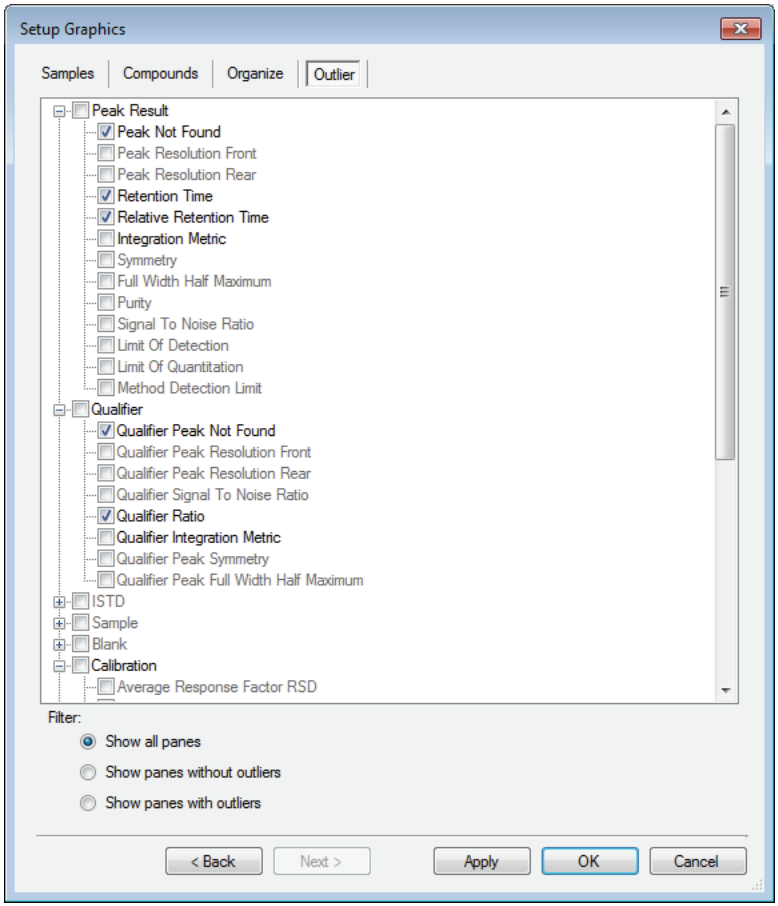
7 Задайте отображение выбросов в окне **Соединения навскидку**.

a В главном окне выберите **Вид >Соединения навскидку**.

b Выберите **Макет > Отладка макета**.

В таблице **Главная** нажмите **Отладка макета**.

c Щелкните по вкладке **Выброс**, чтобы появилась вкладка **диалоговое окно «Отладка графиков»**, используемая для регулировки параметров выброса. Выбросы, отображенные в окне **Соединения навскидку**, заданы во вкладке **Выброс** диалогового окна **Отладка графиков**.

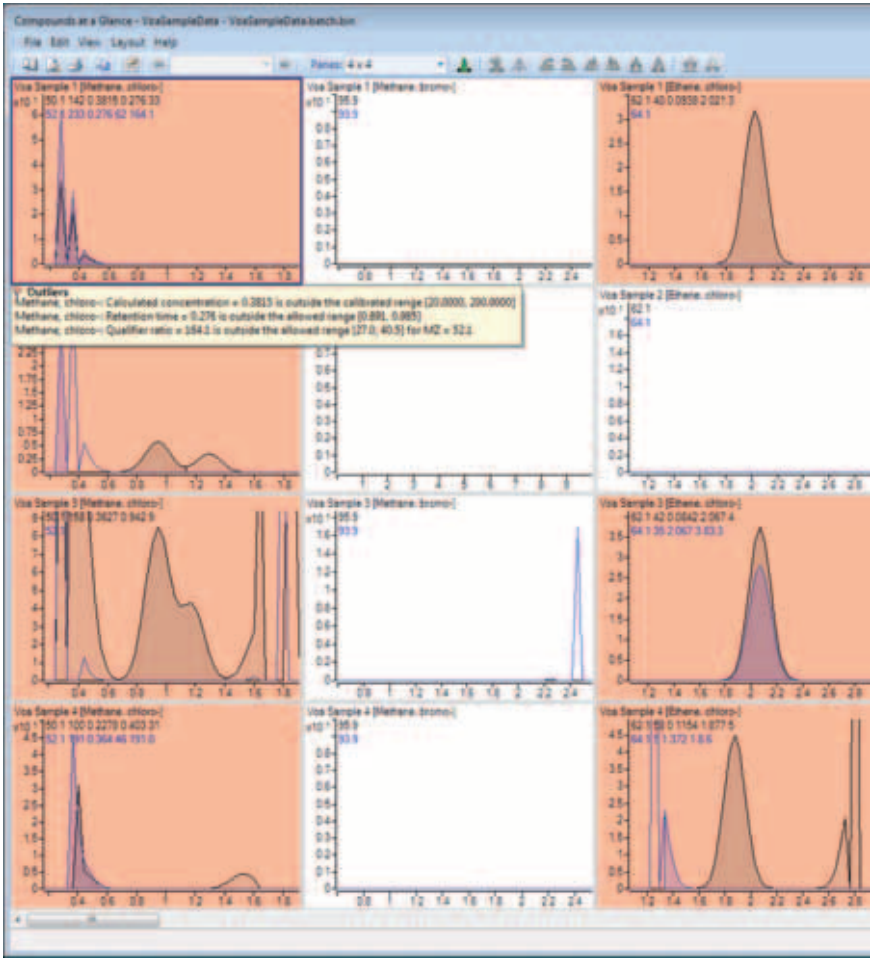


d Как уже делалось ранее с параметрами выбросов **таблицы серии**, выберите значения по умолчанию, выделенные жирным шрифтом, но снимите флажок в поле **Пик не найден**. Также снимите флажки в полях **Метрика интегрирования** и **Метрика интегрирования квалификатора**, так как они не функционируют с интегратором **Общий**.

e В области **Фильтр** выберите **Показать все панели**.

f Нажмите **OK**, чтобы применить эти параметры к представлению. Светло-оранжевые хроматограммы представляют собой соединение в пробе, где существует выброс.

g Наведите мышь на хроматограмму, чтобы появилось сообщение **Выброс - Сводка** для соединения этой пробы.

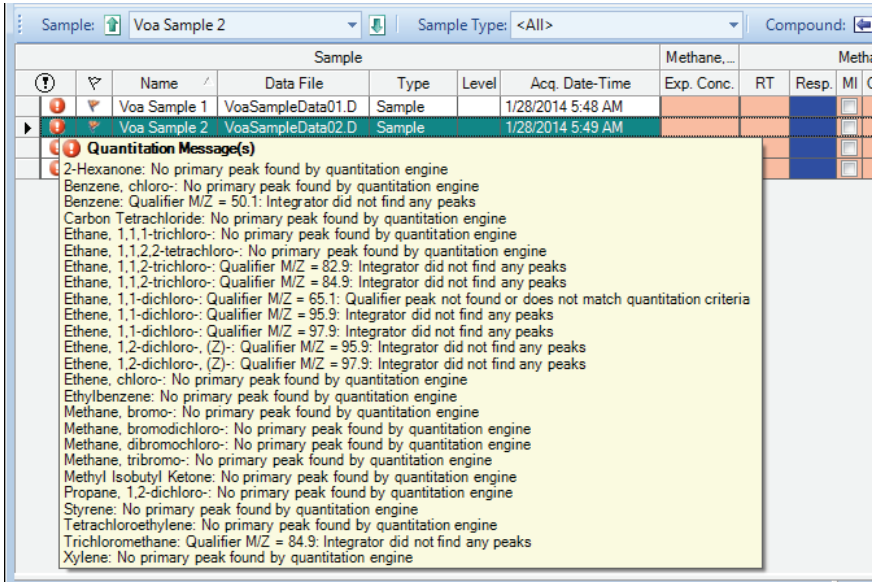


Задание 2. Просмотр сообщений количественного анализа

Сообщения количественного анализа приводятся для информации, но необязательно для определения нахождения за пределами допустимого диапазона значений. Хорошим примером сообщения количественного анализа является невозможность найти пик, заданный в методе количественного анализа в пробе неизвестного соединения. Мы рассмотрим, как предотвратить появление сообщения о невозможности обнаружения пика.

1 Просмотрите сообщения количественного анализа для одной пробы в **таблице серии**.

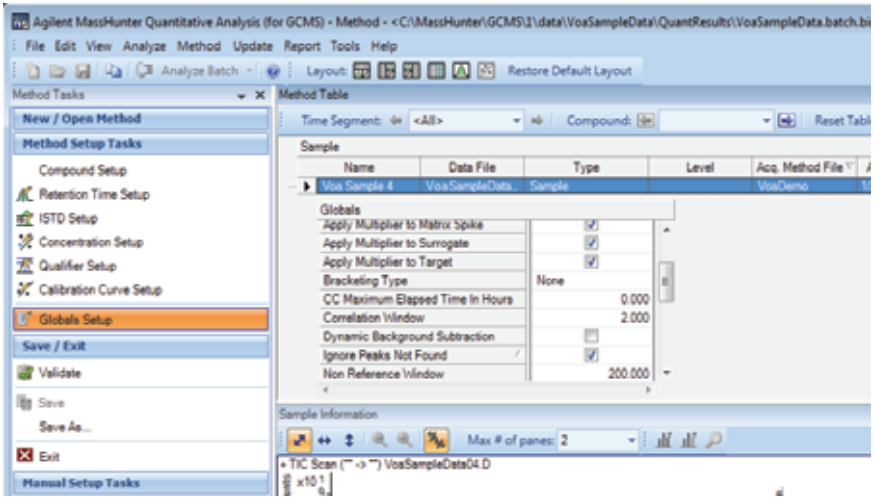
Для **Voa Sample 2** наведите мышь на значок **Сводное сообщение о количественном анализе** (восклицательный знак внутри залитого красным круга), чтобы появились **Сообщения количественного анализа**. Все сообщения в нашем примере связаны с тем, что в пробе не обнаружены калибровочные соединения.



2 Предотвратите появление сообщений количественного анализа в **таблице серии**, связанных с отсутствием пиков.

a Выберите **Метод > Правка**.

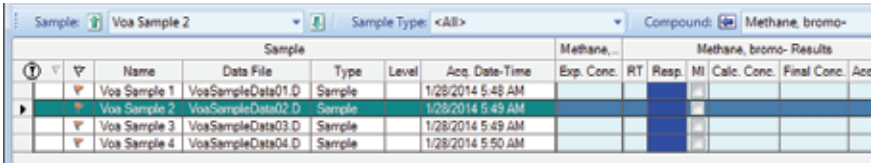
b Выберите Отладка **глобальных параметров** в области **Задачи метода**, а затем выберите **Игнорировать ненайденные пики** в **таблице метода**.



c Выберите **Метод > Выход**. Появится диалоговое окно **Применить метод**.

d Выберите **Анализировать**, а затем нажмите **Да**. Анализ будет выполнен с пересмотренными параметрами метода.

e Обратите внимание на отсутствие значков **Сводка о количественном анализе**. Сравните с предыдущими сообщения в значках **Сводка о количественном анализе** для **Voa Sample 2** до того, как функция **Игнорировать ненайденные пики** была добавлена в наш метод.



f Сохраните метод как **VoaSampleData2.batch.bin**.

Задание 3. Отладка выбросов

В предыдущих заданиях этого упражнения рассматривалась установка представлений выбросов с помощью параметров выбросов по умолчанию программы MassHunter. В данном задании рассматривается, где можно отредактировать параметры выбросов по умолчанию, а также установка выбросов, отличных от значений по умолчанию.

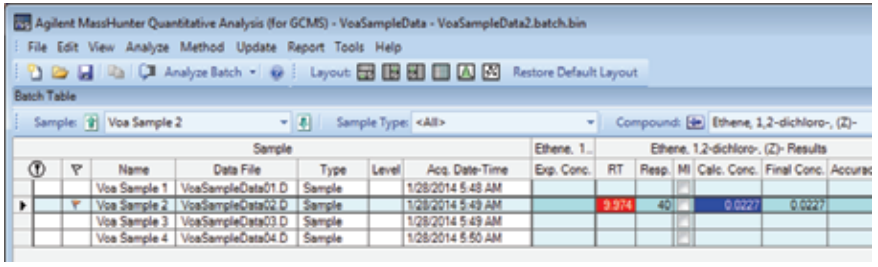
1 Выберите **Файл > Открыть серию** и загрузите файл **VoaSampleData2.batch.bin**.

2 Отредактируйте допустимый диапазон для выброса ВУ.

a В раскрывающемся списке **Соединение** в панели инструментов **таблицы серии** выберите **Этилен, 1,2-дихлор**.

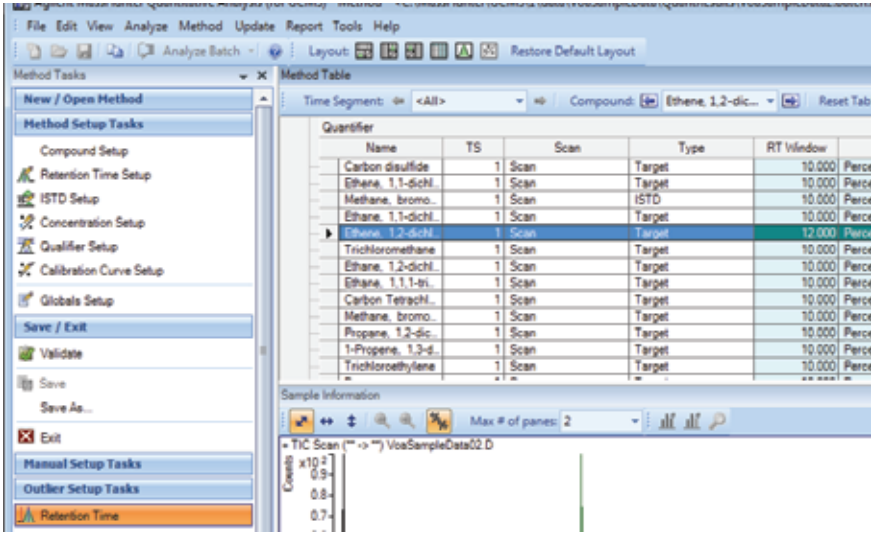
b В таблице выберите пробу **Voa Sample 2**.

Обратите на выделенную красным ячейку ВУ для соединения выбранной пробы.



c Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить в режим редактирования метода.

d В окне **Задачи метода** щелкните **Задачи отладки выбросов > Время удерживания**. Обратите внимание, что соединение, выбранное в таблице **Квантификатор**, является тем же соединением, что выбрано и в **таблице серии**.

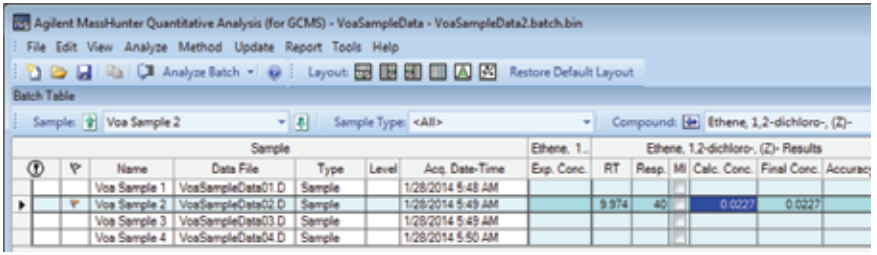


e Установите для параметра **Окно ВУ** значение **12**.

f Выберите **Метод > Выход**.

g Выберите **Анализировать**, а затем нажмите **Да**. Будет выполнен анализ с пересмотренным методом, расширяющим допустимый диапазон для **Времени удерживания**. На экране снова появится окно **таблицы серии**.

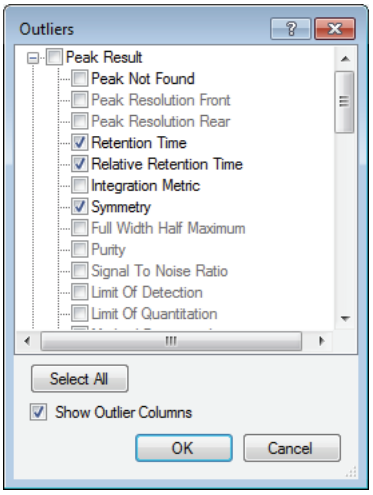
Выброс, помеченный ячейкой **ВУ** с красной заливкой, теперь исчез. Это свидетельствует о том, что в результате внесения в допустимый диапазон ВУ изменения он теперь включает и этот результат.



3 Пусть новый выброс отобразится в **таблице серии**.

a Щелкните значок **Выбор выбросов** , чтобы открыть диалоговое окно **Выбросы**.

b В группе **Результаты по пику** выберите выброс **Симметрия**.



c Выберите **Показать столбцы выброса**, чтобы добавить столбец **Симметрия** в область результатов для целевого соединения в **таблице серии**.

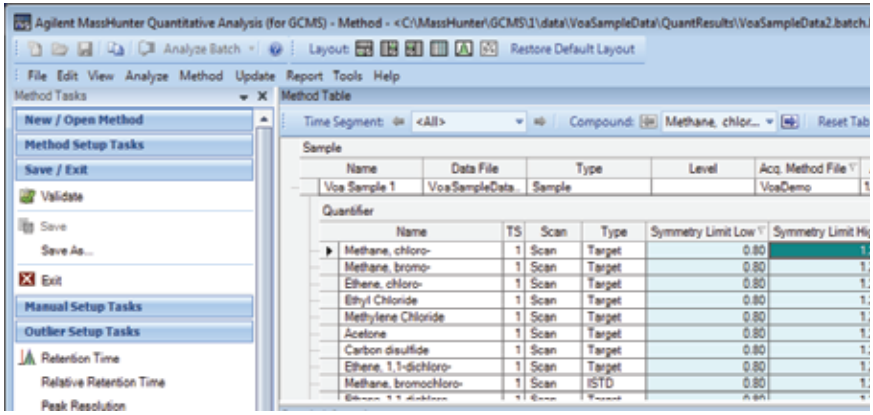
d Нажмите **OK**, чтобы активировать отображение выбросов **Симметрия**.

e Щелкните значок **Выключить фильтр выбросов** , если он еще не выбран, чтобы отобразить все пробы.

4 Задайте новый выброс в методе.

a Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить в режим редактирования метода.

b В окне **Задачи метода** щелкните **Задачи отладки выбросов > Симметрия пика**.

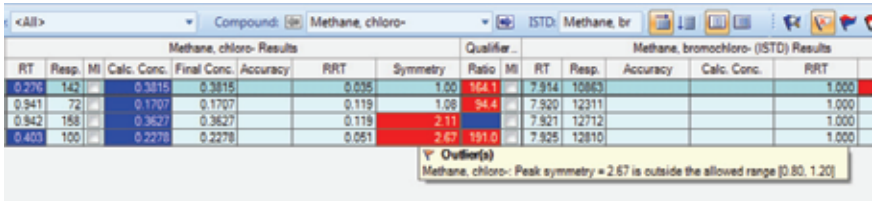


c Установите для параметра **Нижний предел симметрии** значение **0,80**.

d Установите для параметра **Верхний предел симметрии** значение **1,20**.

e Выберите **Метод > Выход**. Появится диалоговое окно **Применить метод**.

f Выберите **Анализировать**, а затем нажмите **Да**. Таким образом, анализ будет выполнен с пересмотренным методом, а выброс **Симметрия** — добавлен в метод.



Новый выброс **Симметрия** обнаруживает размытие пика соединения хлорметана в двух пробах, что видно из залитых красным ячеек столбца **Симметрия**.

5 Создание отчетов о количественном анализе

Задание 1. Создание метода отчета 102

Задание 2. Формирование отчета 108

С помощью этого упражнения вы научитесь:

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

В этом упражнении используется серия **VoaSamples**.

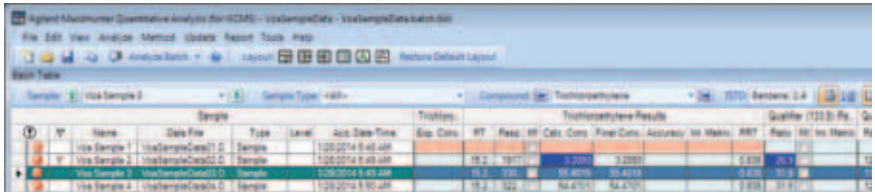
Разрабатываемый метод отчета определяет отчет, создаваемый в приложении MassHunter. Методы отчета создаются из одного или нескольких шаблонов отчета, объединенных вместе и отредактированных в соответствии с потребностями отчетности. Для разработки отчетов можно использовать шаблоны либо в формате Excel, либо в формате PDF. Отчеты на основе PDF-шаблонов могут формироваться в 20 раз быстрее, чем на основе шаблонов Excel. Кроме того, они обладают множеством параметров расширяемости и быстродействия.

Задание 1. Создание метода отчета

В этом упражнении вы разработаете метод отчета с использованием PDF-шаблонов.

1 Чтобы запустить программу **Quantitative Analysis**, щелкните значок **MS Quantitative Analysis** на рабочем столе. Можно также открыть программу, выбрав **Пуск (Windows) > Все программы > Agilent > MassHunter Workstation > MS Quantitative Analysis**.

Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов. На вкладке **Главная** выберите пункт **Восстановить макет по умолчанию**.



2 Выберите команду **Открыть серию**  на панели инструментов.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Открыть**.

3 Перейдите к каталогу, содержащему серию **VoaSamples**.

4 При открытой **таблице серии** щелкните элемент **Анализировать серию** на панели инструментов, чтобы сформировать результаты.

На вкладке **Главная** выберите пункт **Анализировать серию**.

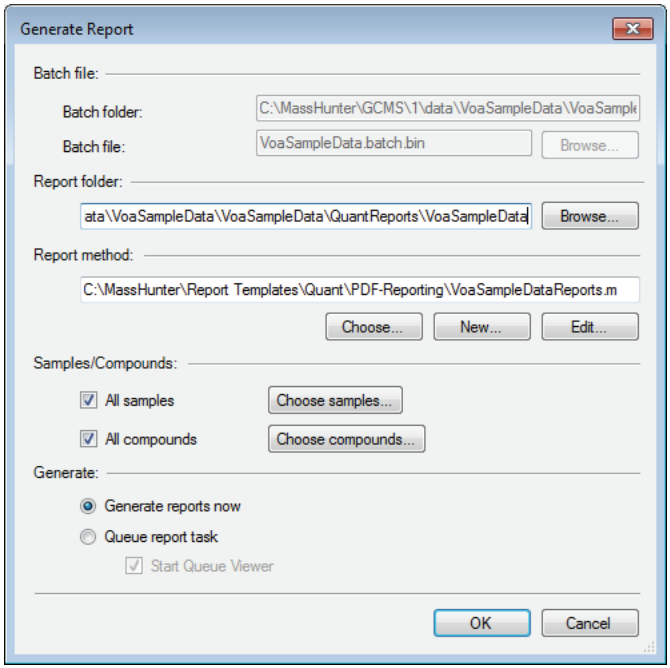
Если количественный анализ серии уже выполнен, пропустите этот шаг и перейдите к шагу 5.

5 Выберите **Файл > Сохранить серию**, чтобы сохранить серию. Отчеты о количественном анализе содержат сведения о пробах, сформированные во время анализа серии. Функция составления отчетов не будет работать до тех пор, пока не будет выполнен количественный анализ проб и сохранены результаты.

6 Создайте метод отчета в формате PDF.

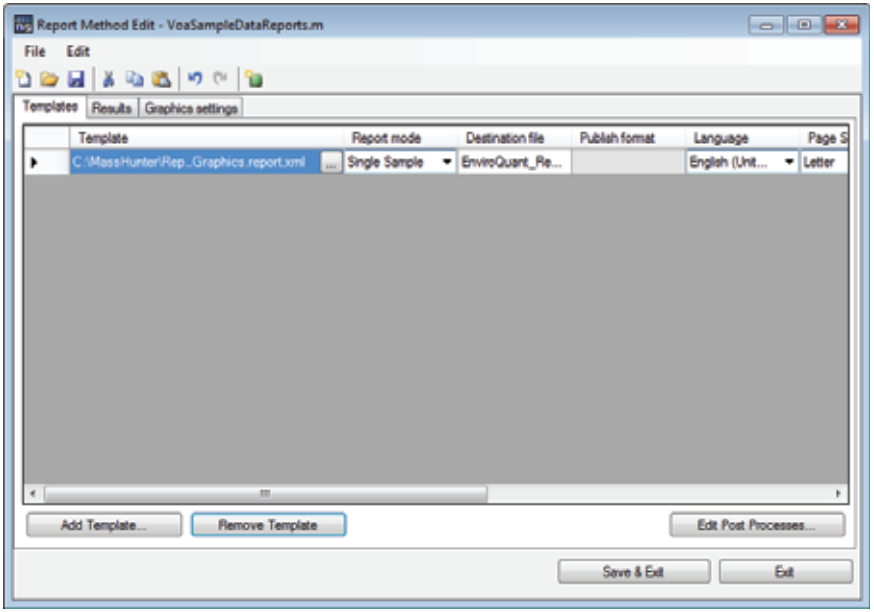
a Выберите **Отчет > Создать**.

На вкладке **Главная** выберите элемент **Создать отчет**.



b Примите используемую по умолчанию **Папку отчета** для этого отчета.

c Выберите элемент **Создать** в поле **Метод отчета**, чтобы создать новый метод отчета.



d Выберите элемент **Добавить шаблон** в диалоговом окне **Правка метода отчета**, чтобы открыть браузер.

e Перейдите в каталог **MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting**, выберите шаблон и нажмите кнопку **Открыть**. Программа добавит шаблон в поле **Шаблон** в диалоговом окне **Правка метода отчета**.

f Повторите шаги **d** и **e**, чтобы добавить второй шаблон.

В поле **Папка отчета** можно изменить каталог для сохранения отчета.

Программная функция **правки метода отчета** позволяет объединять существующие шаблоны в метод отчета для разработки отчета в формате Excel или PDF либо в обоих форматах.

По умолчанию система использует последний метод отчета, с помощью которого был сформирован последний отчет. Вместо того чтобы формировать новый метод отчета, можно использовать метод по умолчанию, если он подходит, либо выбрать другой существующий метод.

Чтобы выбрать существующий метод отчета, щелкните элемент **Выбрать** в поле **Метод отчета** и перейдите в папку, чтобы выбрать метод.

7 Отредактируйте метод отчета, чтобы создать PDF-отчеты для одной пробы или серии.

В диалоговом окне **Правка метода отчета** можно редактировать определенные функции шаблонов, выбираемых для включения в метод отчета.

Функция составления отчетов в формате PDF позволяет создавать отчеты на английском, китайском, японском и русском языках. Отчеты в формате Excel предоставляются только на английском языке, поэтому данный параметр будет затенен.

В отчетах Excel имеются ограничения на размер бумаги. В отчетах PDF предусмотрен выбор вариантов.

Кроме того, можно выбрать **Формат публикации**. Для отчетов в формате PDF доступен только один формат публикации, поэтому данное поле затенено в этом примере.

a В диалоговом окне **Правка метода отчета** выберите пункт **Одна проба** в раскрывающемся списке столбца **Режим отчета** в первой строке шаблона.

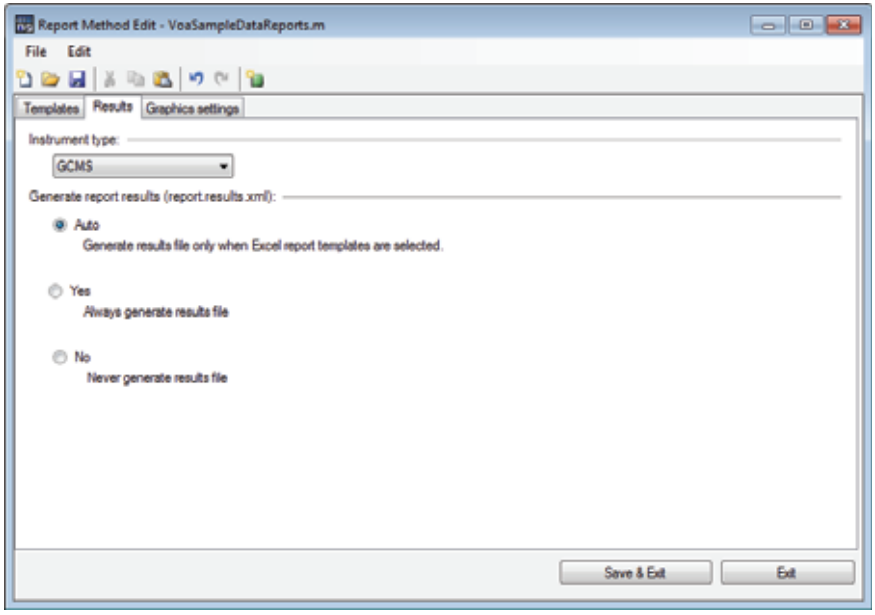
b Во второй строке шаблона выберите **Серия** в раскрывающемся списке столбца **Режим отчета**.

c В раскрывающемся списке столбца **Язык** выберите нужный язык.

d В раскрывающемся списке поля **Размер бумаги** выберите нужный размер.

8 Выберите способ обработки результатов отчета системой.

a На вкладке **Результаты** выберите вариант **ГХМС** в раскрывающемся списке **Тип прибора**.

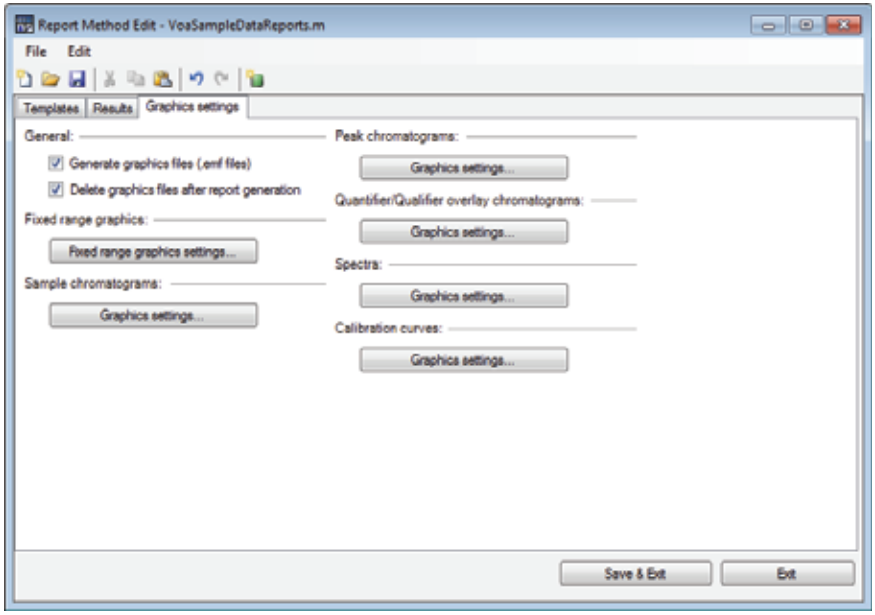


b В разделе **Формировать файл результатов отчета** выберите пункт **Автоматически**.

Вариант **Автоматически** следует использовать в большинстве случаев. При такой настройке файл отчета будет формироваться в формате Excel только в тех случаях, когда выбран отчет в формате Excel. Отчеты в формате PDF формируются быстро и эффективно, когда в формировании файла Excel нет необходимости.

9 Задайте параметры графиков для метода.

a На вкладке **Параметры графиков** выберите пункт **Формировать файлы графиков**, чтобы в отчет добавлялись графики.



b Для остальных параметров графиков оставьте значения по умолчанию.

На вкладке **Параметры графиков** можно задавать внешний вид графиков в отчете, изменяя параметры **Перекрывающиеся хроматограммы квантификатора/квалификатора**, **Спектры**, **Хроматограмма пробы**, **Калибровочные кривые** и **График с фиксированным диапазоном**. Если не изменить эти параметры, программа применит стандартные значения, подходящие для данных.

10 Нажмите кнопку **Сохранить** в окне **Правка метода отчета**.

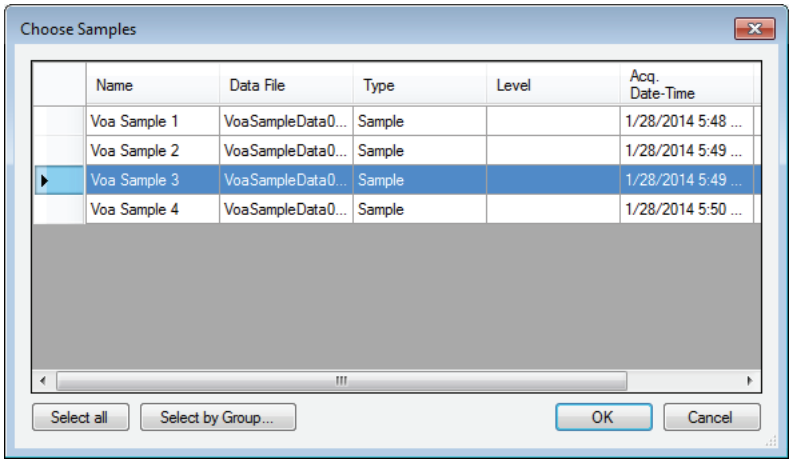
11 Присвойте методу отчета имя **VoaSamples.m.**

12 Выберите элемент **Сохранить и выйти**, чтобы закрыть диалоговое окно **Правка метода отчета** и вернуться в окно **Формирование отчета**.

Задание 2. Формирование отчета

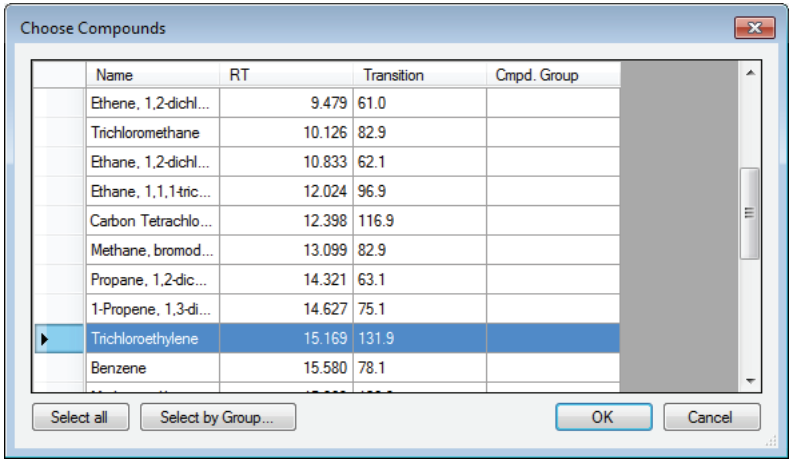
1 Убедитесь в том, что только что созданный метод указан в поле **Метод отчета**.

2 В поле **Пробы/соединения** выберите элемент **Выбрать пробы**, чтобы открыть диалоговое окно **Выбор проб**.

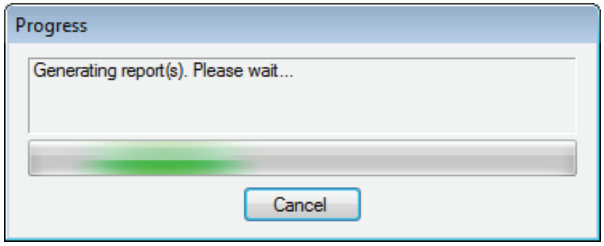


3 Выберите пробы для включения в отчет и нажмите **OK**.

4 Выберите элемент **Все соединения**, затем выберите пробы для включения в отчет и нажмите **OK**.



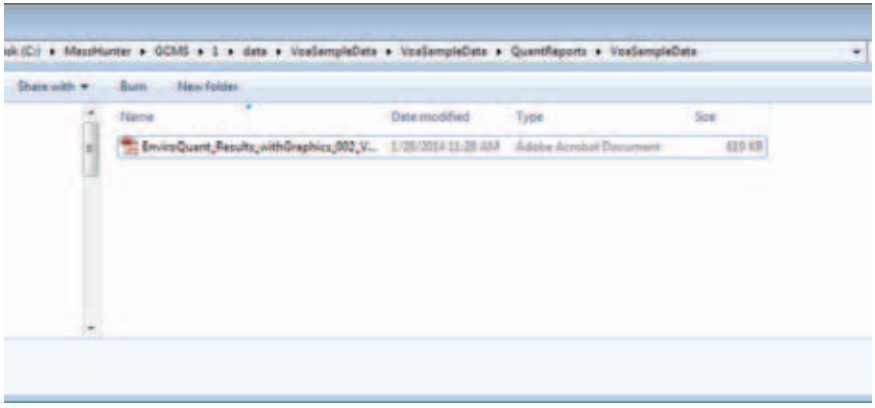
5 Выберите элемент **Сформировать отчеты сейчас** и нажмите кнопку **OK**, чтобы сформировать отчет.



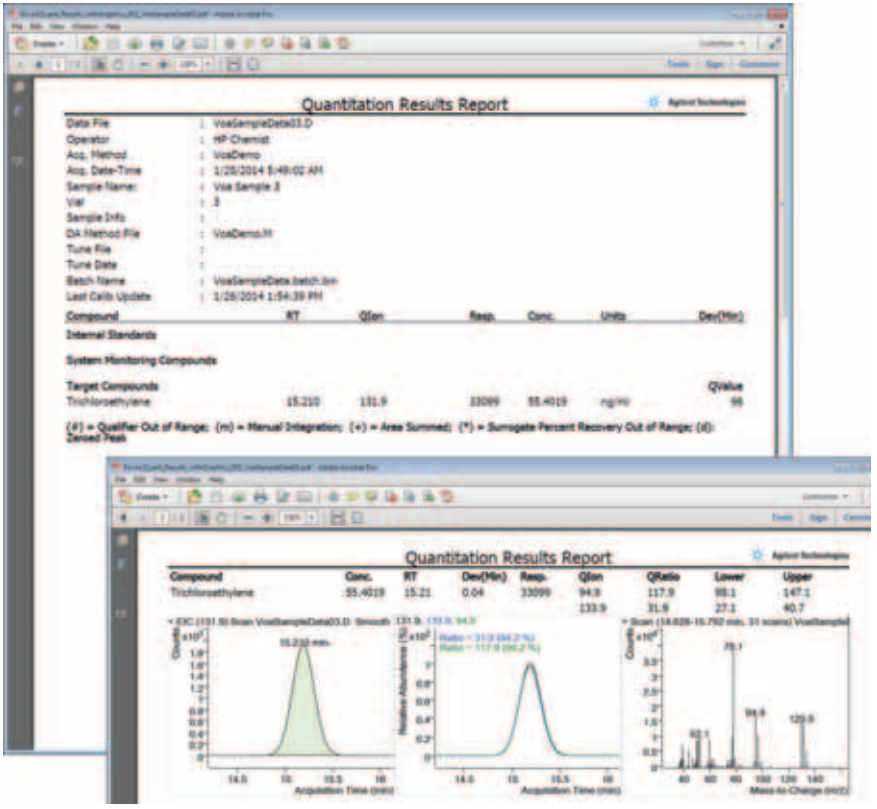
В отчете можно показывать все пробы и все соединения серии либо определенные пробы или соединения, выбранные в таблице серии.

Отчеты в формате PDF формируются быстро, поэтому функция **Сформировать отчеты сейчас** лучше всего подходит для немедленного получения отчета. Если наряду с отчетом формируется файл Excel, то можно выбрать элемент **Поставить в очередь задачу отчета**, чтобы наблюдать за процессом формирования отчета.

Для перехода к любому созданному отчету выберите **Отчет > Открыт папку отчета**. Просмотр и печать отчетов осуществляются из созданного файла Excel или PDF.



6 Дважды щелкните файл, чтобы открыть и вывести на экран отчет. Или же отчет можно открыть, выбрав файл в проводнике Windows.



www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2018

Август 2018 г.

G7077-98026

Agilent