



Программное обеспечение Agilent MassHunter  
Workstation

**Количественный анализ**

**Ознакомительное руководство Quant  
Mu-Way**

## Примечания

© Agilent Technologies, Inc. 2021

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

G3336-98057

### Издание

Издание 1-е, ноябрь 2021 г.

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.

# Введение

## Введение

Выбор значков рабочего стола для программы Quantitative Analysis **6**

Подготовка к выполнению упражнений **6**

## Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

Задание 1. Отладка новой серии **8**

Задание 2. Отладка нового метода для серии **11**

Задание 3. Отладка целевых соединений **14**

Задание 4. Отладка количественного анализа **17**

Задание 5. Установка интегратора **23**

Задание 6. Анализ и сохранение метода **25**

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

Задание 1. Отладка новой серии **29**

Задание 2. Отладка нового метода для серии **32**

Задание 3. Отладка целевых соединений **36**

Задание 4. Отладка количественного анализа **37**

Задание 5. Анализ и сохранение метода **39**

## Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии **42**

Задание 2. Изменение макетов окна результатов **46**

Задание 3. Экспорт и печать результатов **54**

#### Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой **58**

Задание 2. Непараметрическое интегрирование **61**

Задание 3. Обнаружение выбросов **75**

#### Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

##### Справка

Десять главных возможностей **90**

Методы количественного анализа **95**

Непараметрический интегратор **96**

Краткий обзор серии: Результаты **98**

Краткий обзор соединений **99**

Подтверждение соединения **101**

Калибровка соединения **103**

# Введение

Выбор значков рабочего стола для программы Quantitative Analysis 6

Подготовка к выполнению упражнений 6

# Выбор значков рабочего стола для программы Quantitative Analysis

При установке программы Quantitative Analysis на рабочем столе создаются значки для пользовательских интерфейсов **Classic** и **Quant-My-Way**. Пользовательский интерфейс Classic по виду и принципу работы напоминает пользовательский интерфейс Quantitative Analysis 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 зависимости от способа установки программы Quantitative Analysis на рабочем столе могут находиться разные значки, означающие разные типы приборов. При запуске программы Quantitative Analysis с помощью этих значков происходит установка значений по умолчанию и некоторых функций в соответствии с выбранным типом прибора.

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

В настоящем *Ознакомительном руководстве* рассматривается пользовательский интерфейс **Quant-My-Way**.

## Подготовка к выполнению упражнений

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

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

# Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

- Задание 1. Отладка новой серии 8
- Задание 2. Отладка нового метода для серии 11
- Задание 3. Отладка целевых соединений 14
- Задание 4. Отладка количественного анализа 17
- Задание 5. Установка интегратора 23
- Задание 6. Анализ и сохранение метода 25

В этом упражнении выполняется отладка метода количественного анализа для серии полученных файлов данных. Упражнение выполняется с файлами данных **DrugsOfAbuse** (см. «Подготовка к выполнению упражнений» на стр. 6) и обучает выполнению следующих задач:

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

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 1. Отладка новой серии

# Задание 1. Отладка новой серии

В этой задаче задается таблица серии, содержащая файлы данных для трех неизвестных проб и нескольких калибровочных проб наркотических препаратов: амфетамин, кокаин, метамфетамин и MDMA.

- 1 Щелкните значок **Количественный анализ QQQ** на рабочем столе, чтобы запустить программу Quantitative Analysis. Если программа используется впервые, появится используемый по умолчанию макет, показанный на **Рис. 1**.

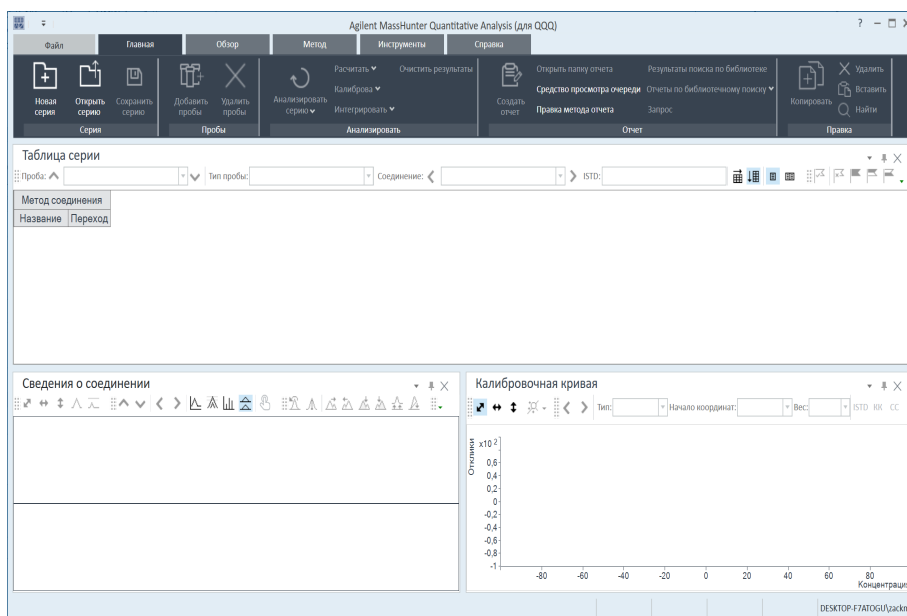


Рис. 1. Макет по умолчанию

Эту программу также можно запустить, выбрав **Программы > Agilent MassHunter Quantitative > Quantitative Analysis (QQQ) (Quant-My-Way)** в меню **Пуск**.

При работе с данными QQQ доступны другие функции.

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

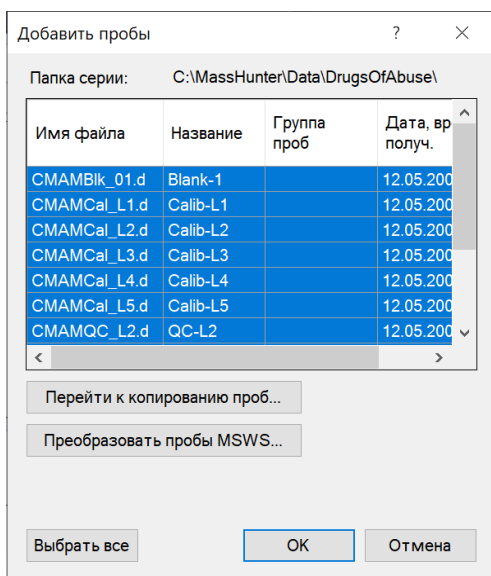
### Задание 1. Отладка новой серии

При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию** перед созданием новой серии.

Restore Default Layout

- 2 Выберите **Файл > Новая серия**. Откроется диалоговое окно **Новая серия**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\DrugsOfAbuse\**.
- 4 Введите имя файла серии **iii\_Test\_01** и щелкните **Создать серию**.
- 5 **Все пробы** должны быть выбраны. нажмите кнопку **ОК**, чтобы добавить их в серию.

**Таблица серии** заполнится. Теперь она содержит калибровочные, контрольные и неизвестные пробы. См. **Рис. 2**.



## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 1. Отладка новой серии

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

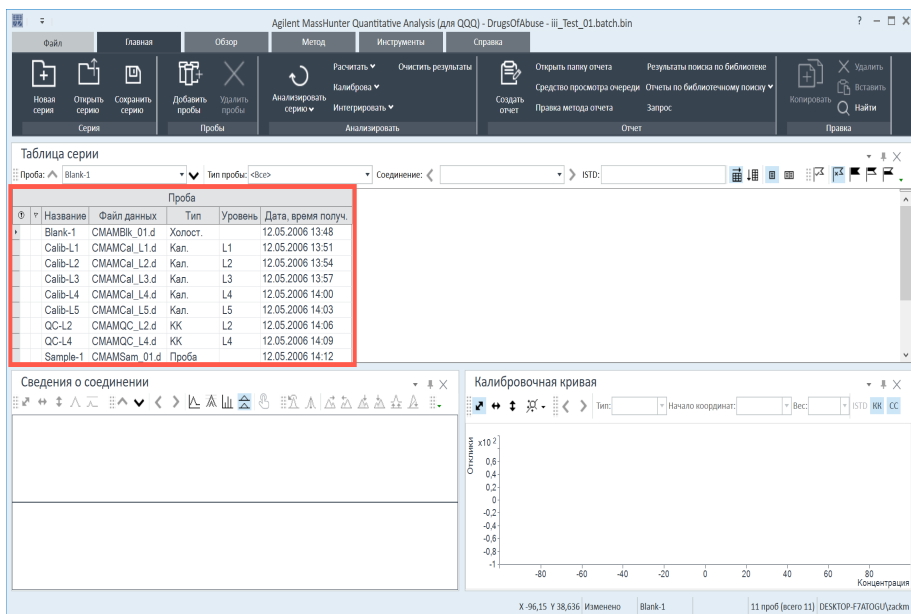


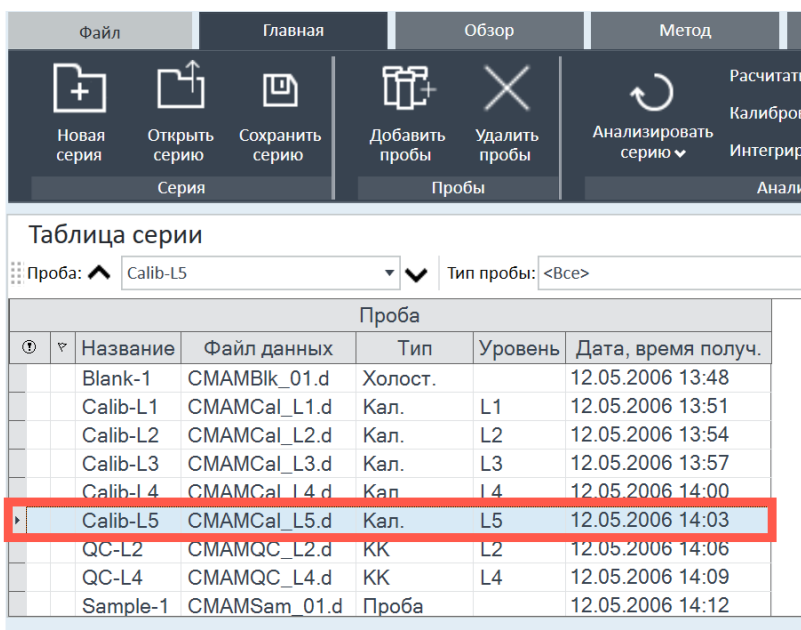
Рис. 2. Таблица серии, содержащая пробы наркотических препаратов (до выполнения количественного анализа)

## Задание 2. Отладка нового метода для серии

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

- 1 С помощью курсора выделите калибровочный стандарт с наибольшим уровнем концентрации, как показано на рисунке внизу.

Использование пробы с интенсивными сигналами соединений, например калибровочной пробы с высокой концентрацией, позволяет программе создать метод с надлежащими временами удерживания и соотношениями квалификаторов.



The screenshot shows the software interface with a ribbon menu at the top and a 'Series Table' (Таблица серии) below. The ribbon menu includes tabs for 'Файл', 'Главная', 'Обзор', and 'Метод'. The 'Метод' tab is active, showing options like 'Расчитать', 'Калибров', and 'Интегрир'. The 'Series Table' has a dropdown menu for 'Проба' set to 'Calib-L5' and 'Тип пробы' set to '<Все>'. The table lists various samples and standards, with the 'Calib-L5' row highlighted in blue and a red box around it.

Таблица серии						
Проба: <input type="text" value="Calib-L5"/> Тип пробы: <input type="text" value="&lt;Все&gt;"/>						
Проба						
ⓘ	▼	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.
		Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 2. Отладка нового метода для серии

- 2 На вкладке **Метод** щелкните **Правка** для переключения в режим редактирования метода.

В левой части экрана отобразится столбец **Задачи метода**, как показано на **Рис. 3**.

Обратите внимание на то, что на **Рис. 3** показан используемый по умолчанию макет для редактирования метода.

При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию** перед созданием нового метода на следующем шаге.

Agilent MassHunter Quantitative Analysis (для QQQ) - Метод - <C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantResults\jiii\_Test\_01.batch.bin>

Метод

Задачи отладки метода

Дополнительные задачи

Совпадающие соединения

Поменять квалификатор на квалификатор

Генерировать квалификаторы из библиотеки - GX

Генерировать квалификаторы из библиотеки - JX

Метод библиотеки

Отладка эталонной библиотеки

Отладка эталонной библиотеки образцов данных

Библиотека

Задачи отладки метода

Библиотека

Задачи мет...

Создать/открыть метод

Рабочий процесс

Задачи отладки метода

Отладка соединения MRM

Отладка времени удерживания

Отладка ISTD

Отладка концентрации

Отладка квалификатора

Отладка калибровочной кривой

Отладка глобальных параметров

Сохранить/Выйти

Валидировать

Сохранить

Сохранить как...

Выход

Задачи ручной отладки

Задачи отладки выбросов

Дополнительные задачи

Таблица метода

Временной сегмент: < <Все> >

Соединение: < >

Сброс вида таблицы

Проба					
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
Calib-L5	CMAMCal_L...	Кал.	L5	APClautotune.m	12.05.2006 14:03

Сведения о пробе

MC: Все

Сигнал: <Нет>

Макс. число панелей: 2

TIC MRM (" -> ") CMAMCal\_L5.d

Counts x10<sup>4</sup>

Acquisition Time (мин)

Сведения о соединении

0 соединений (всего 0) 0 ISTD (всего 0) DESKTOP-F7ATOGU\zackm

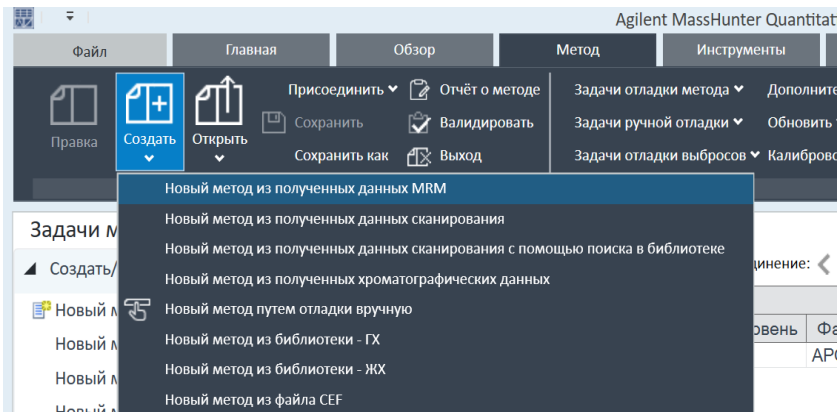
Рис. 3. Режим редактирования метода

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

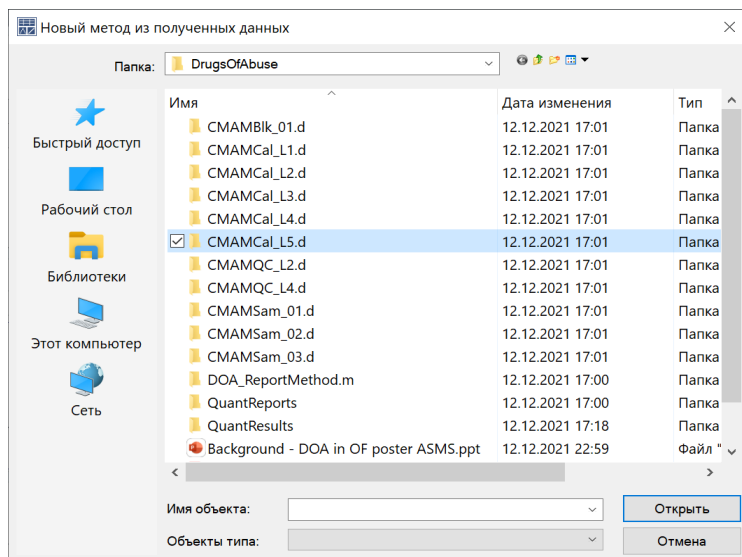
### Задание 2. Отладка нового метода для серии

- 3 В столбце **Задачи метода** на боковой панели слева от панели **Таблица метода** выберите **Создать/открыть метод > Новый метод из полученных данных MRM**.

В качестве альтернативы выберите на вкладке метода **Создать > Новый метод из полученных данных MRM**.



- 4 Выберите **Нет** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?** Система выведет на экран диалоговое окно **Новый метод из полученных данных**.
- 5 Щелкните ячейку **CMAMCal\_L5.d** и нажмите кнопку **Открыть**, чтобы импортировать сведения о методе сбора данных.



## Задание 3. Отладка целевых соединений

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

- 1 На боковой панели **Задачи метода** слева от окна **Таблица метода** выберите **Задачи отладки метода > Отладка соединения MRM**.

В метод сбора данных будут введены названия соединений, связанных с переходами MRM. По умолчанию самый сильный сигнал выбирается в качестве иона-квантификатора.

The screenshot shows the software interface with the 'Method Tasks' sidebar on the left. The 'MRM Connection Debugging' option is highlighted with a red box. The main window displays the 'Method Table' with a table of MRM transitions and a chromatogram below.

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Материнский ион	Дочерний ион	ВУ	Полярность ионов	Энергия соударений	Дельта энергии соударений
Amp	1	136,2 ->..	MRM	Целев..	136,2	91,4	2,102	Positive		0,0
Amp-d5	1	141,1 ->..	MRM	ISTD	141,1	93,4	2,078	Positive		0,0
Cocaine	1	304,1 ->..	MRM	Целев..	304,1	182,0	2,449	Positive		0,0

Below the table, the 'Information about the sample' section shows a chromatogram with two peaks. The y-axis is labeled 'Count x10<sup>4</sup>' and the x-axis is labeled 'x10<sup>1</sup>'. The peaks are labeled with their retention times: 3.0 and 4.0.

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

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 3. Отладка целевых соединений

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

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Amp	1	136,2 ->..	MRM	Целев...	2,102	1,000	1,000	Минуты
Amp-d5	1	141,1 ->..	MRM	ISTD	2,078	1,000	1,000	Минуты
Cocaine	1	304,1 ->..	MRM	Целев...	2,449	1,000	1,000	Минуты

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

a Выберите **Задачи отладки метода > Отладка ISTD**.

b В каждой строке целевого соединения щелкните раскрывающую стрелку в ячейке **Название соединения ISTD**. Не пытайтесь ввести название внутреннего стандарта в строке соединения внутреннего стандарта.

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Имя соединения ISTD	Метка ISTD	Конц. ISTD	Эталон по времени
Amp	1	136,2 ->..	MRM	Целев...	<Нет>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Amp-d5	1	141,1 ->..	MRM	ISTD	<Нет>	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Cocaine	1	304,1 ->..	MRM	Целев...	<Нет>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 3. Отладка целевых соединений

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

The screenshot displays the 'Table of method' (Таблица метода) interface. The 'Concentration of internal standard' (Конц. ISTD) column is highlighted with a red box, showing a value of 50,0000 for the 'Meth-d5' connection. Below the table is a chromatogram plot showing peaks at retention times 2.233 and 2.333 minutes.

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Имя соединения ISTD	Метка ISTD	Конц. ISTD	Эталон по времени
Amp	1	136,2 ->	MRM	Целев...	Amp-d5	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Amp-d5	1	141,1 ->	MRM	ISTD	<Нет>	<input type="checkbox"/>	50,0000	<input type="checkbox"/>
Cocaine	1	304,1 ->	MRM	Целев...	Cocaine-d3	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Cocaine...	1	307,1 ->	MRM	ISTD	<Нет>	<input type="checkbox"/>	50,0000	<input type="checkbox"/>
MDMA	1	194,2 ->	MRM	Целев...	MDMA-d5	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
MDMA-d5	1	199,2 ->	MRM	ISTD	<Нет>	<input type="checkbox"/>	50,0000	<input type="checkbox"/>
Meth	1	150,1 ->	MRM	Целев...	Meth-d5	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
Meth-d5	1	155,2 ->	MRM	ISTD	<Нет>	<input checked="" type="checkbox"/>	50,0000	<input type="checkbox"/>

Сведения о пробе  
TIC MRM (" -> ") SMAMCa\_L5.d  
Counts x10<sup>4</sup>  
Acquisition Time (мин) x10<sup>2</sup>  
2.233 2.333

Сведения о соединении

## Задание 4. Отладка количественного анализа

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

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

1 На вкладке **Метод** выберите **Калибровочная кривая > Создать уровни из калибровочных проб**.

Для каждого квантификатора в окне **Таблица метода** откроется таблица **Калибровка**.

2 Для одного из квантификаторов замените используемые по умолчанию концентрации на фактическую концентрацию для каждого уровня.

- L1 – 2,5000
- L2 – 5,0000
- L3 – 12,5000
- L4 – 25,0000
- L5 – 125,0000

The screenshot shows the software interface with the 'Method' tab selected. The 'Method Table' window is open, displaying a table for the 'Amp' quantifier. The table has columns for 'Name', 'Sample File', 'Type', 'Level', 'Method File', and 'Date, Time'. Below this, there is a 'Calibration' table with columns for 'Level', 'Concentration', and 'Response'. The 'L2' level is highlighted, and its concentration is set to 2,0000.

Имя квантификатора	Имя файла данных	Тип	Уровень	Имя файла метода сб. данных	Дата, время получ.		
СМАМС...	СМАМСat_L...						
Квантификатор							
Имя квантификатора	СВ	Переход	Скан	Тип	Имя соединения ISTD	Метка ISTD	Конц.
Amp	1	136,2 ->	MRM	Целев...	Amp-d5		
Калибровка							
Уровень	Конц.	Отклик					
L1		2,5000					
L2		5,0000					
L3		12,5000					
L4		25,0000					
L5		125,0000					
L2	2,0000						

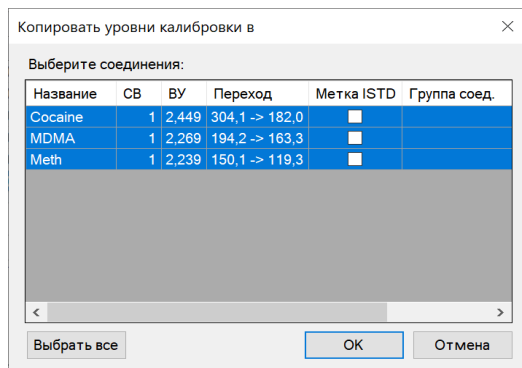
## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 4. Отладка количественного анализа

- 3 Щелкните правой кнопкой мыши в таблице «Квантификатор» и выберите **Копировать уровни калибровки в...**

Откроется диалоговое окно **Копировать уровни калибровки в.**

- 4 Нажмите кнопку **Выбрать все**, затем нажмите кнопку **ОК**.



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

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 4. Отладка количественного анализа

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

Таблица метода

Калибровка	Уровень	Конц.	Отклик
L1		2.5000	
L2		5.0000	
L3		12.5000	
L4		25.0000	
L5		125.0000	
L2		2.0000	
L4		4.0000	

Копировано в кокаин, MDMA и метамфетамин.

Калибровка	Уровень	Конц.	Отклик
L1		2.5000	
L2		5.0000	
L3		12.5000	
L4		25.0000	
L5		125.0000	
L2		2.0000	
L4		4.0000	

Калибровка	Уровень	Конц.	Отклик
L1		2.5000	
L2		5.0000	
L3		12.5000	
L4		25.0000	
L5		125.0000	
L2		2.0000	
L4		4.0000	

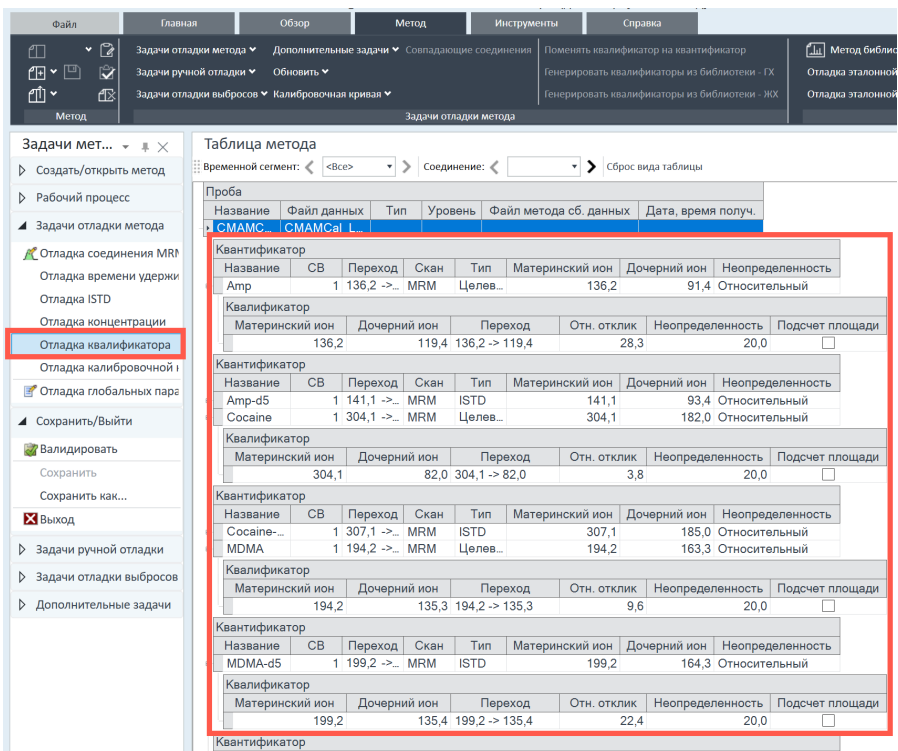
## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 4. Отладка количественного анализа

- 7 В разделе **Задачи отладки метода** выберите **Отладка квалификатора** и проверьте параметры отладки квалификаторов.

Система автоматически заполняет параметры отладки квалификаторов, когда импортирует сведения о сборе данных [MS].

Помимо иона-квантификатора соединения во время создания метода в качестве ионов-квалификаторов назначаются дополнительные переходы MRM.



The screenshot shows the software interface with the 'Method Debug Tasks' menu on the left and the 'Method Table' window on the right. The 'Qualifier Debug' option is highlighted in the menu. The 'Method Table' window displays a list of ion transitions and their parameters, including Name, SV, Transition, Scan, Type, Parent Ion, Child Ion, and Relative Abundance.

Ион	SV	Переход	Скан	Тип	Материнский ион	Дочерний ион	Неопределенность
Amp	1	136,2 ->...	MRM	Целев...	136,2	91,4	Относительный
Материнский ион							
136,2			119,4	136,2 -> 119,4		28,3	20,0
Amp-d5	1	141,1 ->...	MRM	ISTD	141,1	93,4	Относительный
Socaine	1	304,1 ->...	MRM	Целев...	304,1	182,0	Относительный
Материнский ион							
304,1			82,0	304,1 -> 82,0		3,8	20,0
Socaine	1	307,1 ->...	MRM	ISTD	307,1	185,0	Относительный
MDMA	1	194,2 ->...	MRM	Целев...	194,2	163,3	Относительный
Материнский ион							
194,2			135,3	194,2 -> 135,3		9,6	20,0
MDMA-d5	1	199,2 ->...	MRM	ISTD	199,2	164,3	Относительный
Материнский ион							
199,2			135,4	199,2 -> 135,4		22,4	20,0

- 8 В разделе **Задачи отладки метода** выберите **Отладка калибровочной кривой**.

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 4. Отладка количественного анализа

- 9 Для каждого целевого соединения замените значение поля **Начало координат АК** на **Принудительно**.

Задачи метода

Создать/открыть метод

Рабочий процесс

Задачи отладки метода

Отладка соединения MRM

Отладка времени удерживания

Отладка ISTD

Отладка концентрации

Отладка квалификатора

Отладка калибровочной кривой

Отладка глобальных параметров

Сохранить/Выйти

Валидировать

Таблица метода

Временной сегмент: <Все> Соединение: Meth Сброс вида таблицы

Проба

Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
СМАМС...	СМАМСCal_L...				

Квантификатор

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	АК	Начало координат АК	Вес АК
Amp	1	136,2 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Amp-d5	1	141,1 ->...	MRM	ISTD			
Cocaine	1	304,1 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Cocaine-...	1	307,1 ->...	MRM	ISTD			
MDMA	1	194,2 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
MDMA-d5	1	199,2 ->...	MRM	ISTD			
Meth	1	150,1 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Meth-d5	1	155,2 ->...	MRM	ISTD			

- 10 В разделе «Сохранить/Выйти» выберите «Валидировать», чтобы проверить правильность отладки метода. Внизу экрана можно увидеть все ошибки, выявленные во время валидации.

Отладка времени удерживания

Отладка ISTD

Отладка концентрации

Отладка квалификатора

Отладка калибровочной кривой

Отладка глобальных параметров

Сохранить/Выйти

Валидировать

Сохранить

Сохранить как...

Выход

Задачи ручной отладки

Задачи отладки выбросов

Дополнительные задачи

Название СВ Переход Скан Тип АК Начало координат АК Вес АК

Amp	1	136,2 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Amp-d5	1	141,1 ->...	MRM	ISTD			
Cocaine	1	304,1 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Cocaine-...	1	307,1 ->...	MRM	ISTD			
MDMA	1	194,2 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
MDMA-d5	1	199,2 ->...	MRM	ISTD			
Meth	1	150,1 ->...	MRM	Целев...	Линей...	Принудительно	Нет
Meth-d5	1	155,2 ->...	MRM	ISTD			

Agilent MassHunter Quantitative Analysis

Метод валидирован. Ошибок или предупреждений не обнаружено.

OK

Список ошибок метода

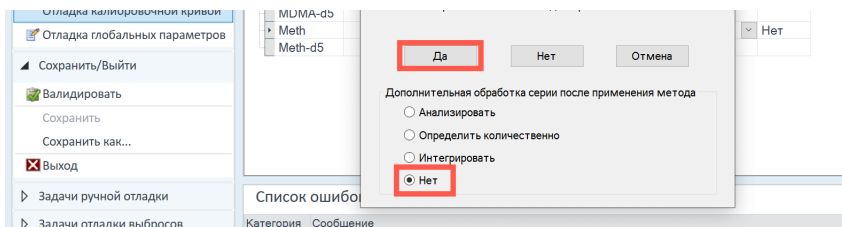
Категория	Сообщение
-----------	-----------

- 11 Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **OK**.
- 12 Выберите **Сохранить/Выйти > Выход**.

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 4. Отладка количественного анализа

- 13 Выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

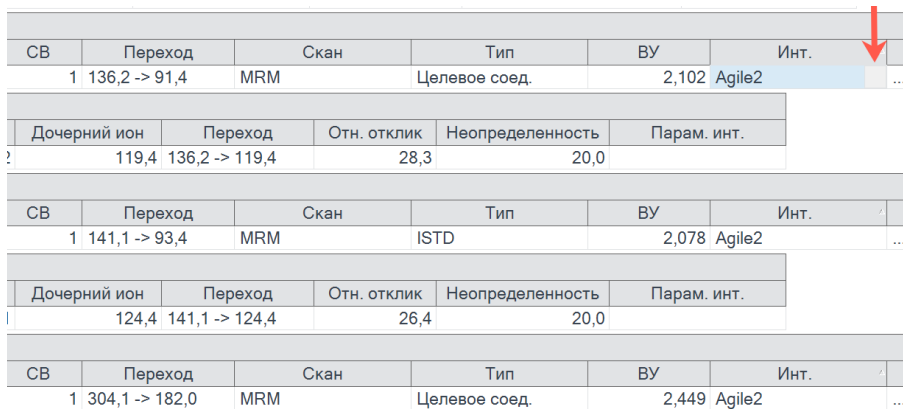


## Задание 5. Установка интегратора

**Шаг 1** Замените используемый по умолчанию интегратор на MS-MS.

Для программы MassHunter Quant рекомендуемым компанией Agilent интегратором по умолчанию является интегратор Agile2 без параметров. Данное задание меняет интегратор Agile2, заданный по умолчанию, на интегратор MS-MS, чтобы продемонстрировать процедуру смены интегратора для всех соединений в методе количественной обработки.

- 1 На вкладке **Метод** щелкните **Правка**.
- 2 Выберите **Дополнительные задачи > Отладка параметров интегрирования**.
- 3 В окне **Таблица метода** щелкните в поле, расположенном в правой части значения **Инт.**



СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Инт.	
1	136,2 -> 91,4	MRM	Целевое соед.	2,102	Agile2	...

Дочерний ион	Переход	Отн. отклик	Неопределенность	Парам. инт.
?	119,4 136,2 -> 119,4	28,3	20,0	

СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Инт.	
1	141,1 -> 93,4	MRM	ISTD	2,078	Agile2	...

Дочерний ион	Переход	Отн. отклик	Неопределенность	Парам. инт.
I	124,4 141,1 -> 124,4	26,4	20,0	

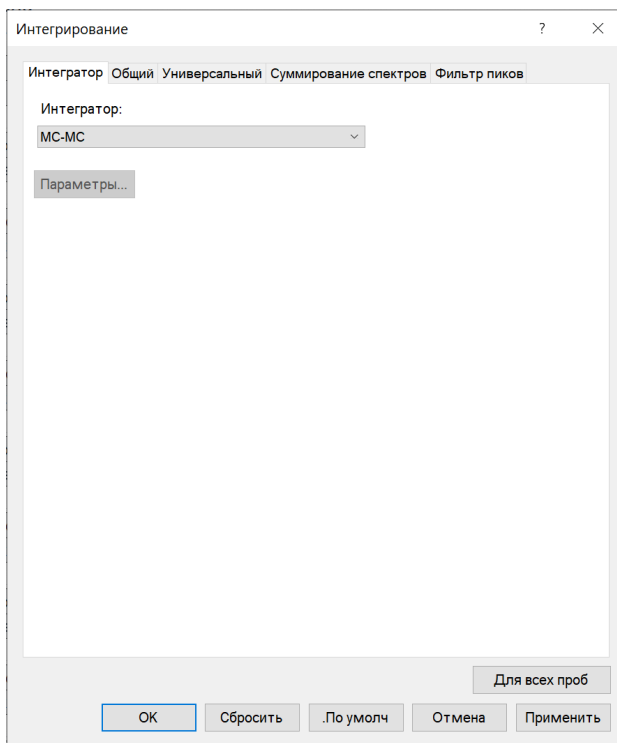
  

СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Инт.	
1	304,1 -> 182,0	MRM	Целевое соед.	2,449	Agile2	...

## 2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

### Задание 5. Установка интегратора

4 Выберите пункт **МС-МС** в раскрывающемся меню.



5 Нажмите кнопку **Применить ко всем**.

6 Нажмите **ОК**.

7 В разделе **Сохранить/Выйти** нажмите кнопку **Выход**.

8 Выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

## Задание 6. Анализ и сохранение метода

В этом упражнении выполняется количественный анализ серии и сохраняются результаты.

- 1 На вкладке «Главная» щелкните «Анализировать серию».
- 2 Наведите курсор на сообщение о количественном анализе пробы 1.
- 3 Наведите курсор на флаги для первых двух калибровочных стандартов.

Обратите внимание на то, что в двух калибровочных стандартах содержатся данные о выбросах.

Обратите внимание на то, что в пробе 1 программа не нашла данных по амфетамину (Amp).

Сообщение о флагах выбросов

Сообщение о количественном анализе

Таблица серии							Метод А
Проба							Метод А
Проба	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. ко	
Blank-1	Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48		
Calib-L1	Calib-L1	CMAMCaL_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5	
Calib-L2	Calib-L2	CMAMCaL_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5,0	
Calib-L3	Calib-L3	CMAMCaL_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5	
Calib-L4	Calib-L4	CMAMCaL_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25,0	
Calib-L5	Calib-L5	CMAMCaL_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125,0	
QC-L2	QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0	
QC-L4	QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0	
Sample-1	Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12		
Sample-2	Sample-2	CMAMSam_02.d	Проба		12.05.2006 14:15		
Sample-3	Sample-3	CMAMSam_03.d	Проба		12.05.2006 14:18		

- 4 На вкладке **Главная** щелкните **Сохранить серию**.
- 5 Выберите **Файл > Закрыть серию**, чтобы закрыть серию.

- 2 **Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM**  
Задание 6. Анализ и сохранение метода

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

- Задание 1. Отладка новой серии 29
- Задание 2. Отладка нового метода для серии 32
- Задание 3. Отладка целевых соединений 36
- Задание 4. Отладка количественного анализа 37
- Задание 5. Анализ и сохранение метода 39

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

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


### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### **Вводные сведения...**

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

## Задание 1. Отладка новой серии

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

- 1 Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок **Количественный анализ (Q-TOF)** на рабочем столе . Если программа используется впервые, появится используемый по умолчанию макет, показанный на **Рис. 4**.

Эту программу также можно запустить, щелкнув **Программы > Agilent MassHunter Quantitative > Quantitative Analysis (Q-TOF)** в меню Пуск.

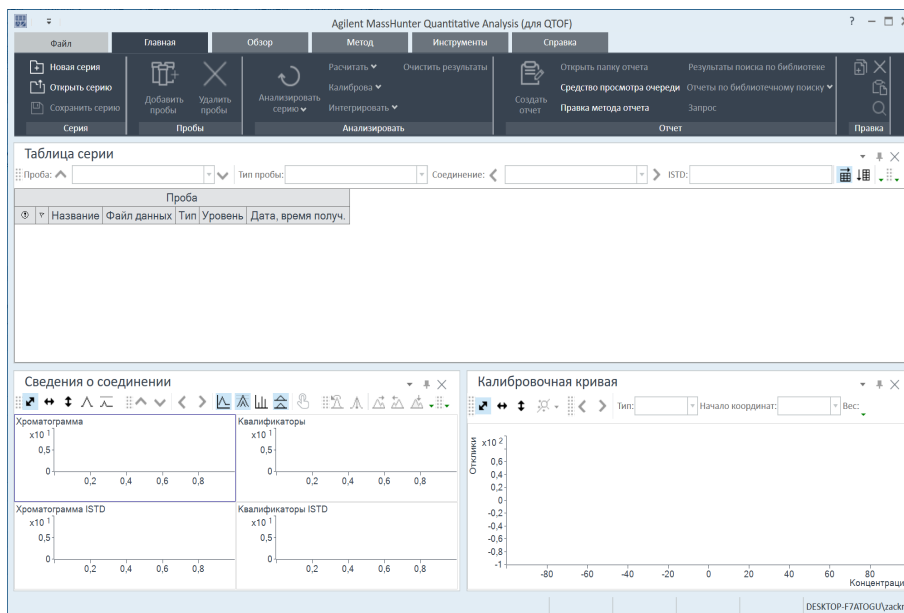


Рис. 4. Макет по умолчанию

- 2 На вкладке **Главная** щелкните **Новая серия**.  
Откроется диалоговое окно **Новая серия**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\LC-QTOF Pesticide\**.
- 4 Введите имя файла серии **iii\_Test\_01** и щелкните **Создать серию**.

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 1. Отладка новой серии

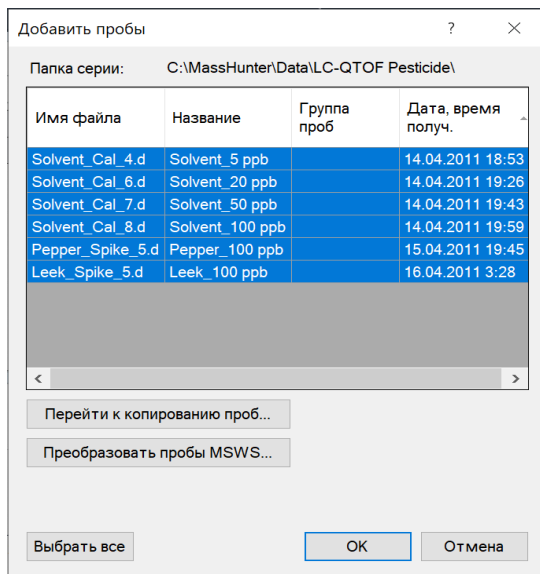
При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию**.

Откроется диалоговое окно **Добавить пробы**. **Все пробы** должны быть выбраны.

- 5 нажмите кнопку **ОК**, чтобы добавить их в серию.

Таблица серии заполнится. Теперь она содержит пробы. См. **Рис. 5** на стр. 31.

- Обратите внимание на то, что калибровочных проб четыре.



### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 1. Отладка новой серии

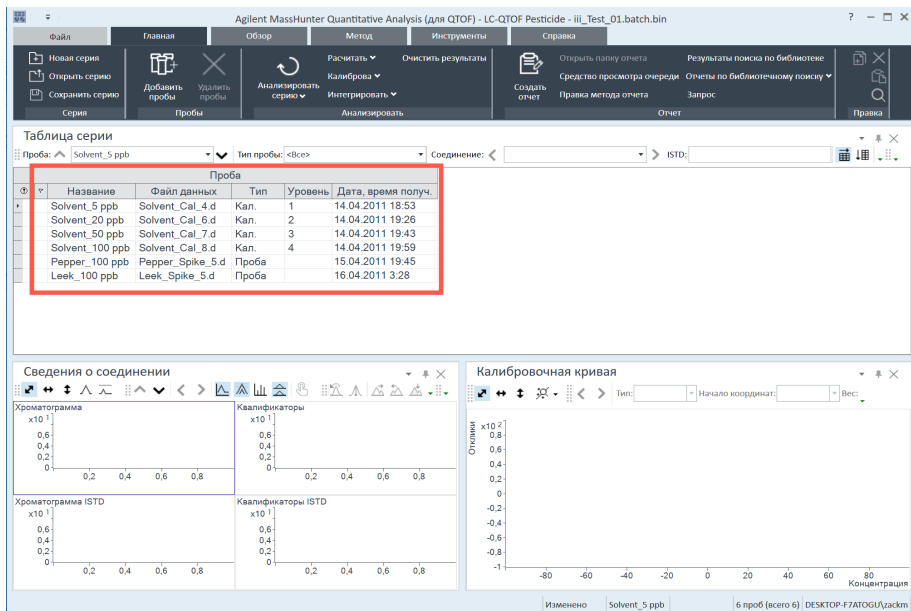


Рис. 5. Таблица серии, содержащая пробы (до выполнения количественного анализа)

## Задание 2. Отладка нового метода для серии

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

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

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

- 1 С помощью курсора выделите калибровочный стандарт с наибольшим уровнем концентрации, как показано на рисунке внизу.

Использование пробы с интенсивными сигналами соединений, например калибровочной пробы с высокой концентрацией, позволяет программе создать метод с надлежащими временами удерживания и соотношениями квалификаторов.

Таблица серии					
Проба: Solvent_100 ppb		Тип пробы: <Все>			
Проба					
№	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.
	Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Кал.	1	14.04.2011 18:53
	Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Кал.	2	14.04.2011 19:26
	Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Кал.	3	14.04.2011 19:43
	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Кал.	4	14.04.2011 19:59
	Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Проба		15.04.2011 19:45
	Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Проба		16.04.2011 3:28

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 2. Отладка нового метода для серии

#### 2 На вкладке **Метод** щелкните **Правка**.

В левой части экрана отобразится столбец **Задачи метода**, как показано на **Рис. 6** на стр. 33.

Обратите внимание на то, что на **Рис. 6** показан используемый по умолчанию макет для редактирования метода.

#### 3 При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию**.

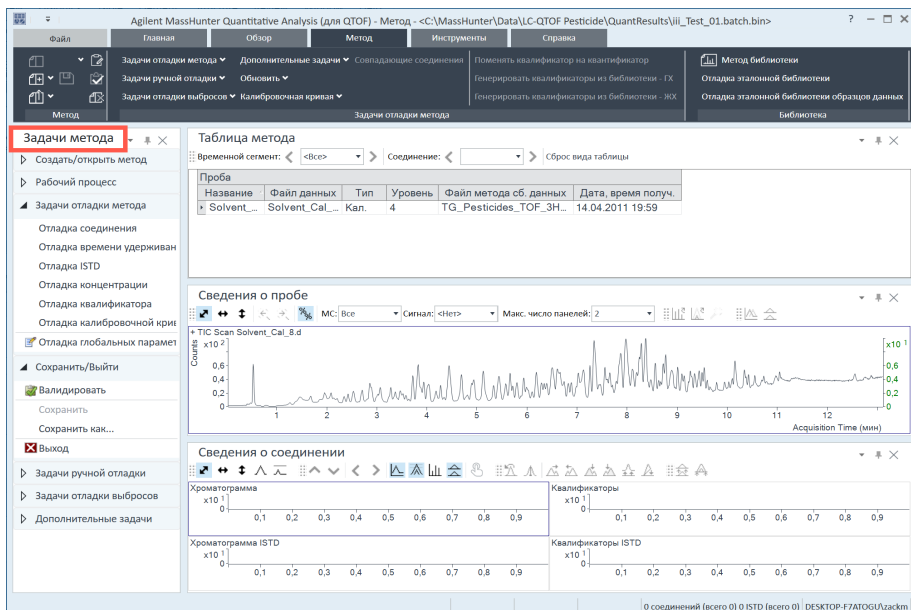


Рис. 6. Режим редактирования метода

#### 4 В окне **Сведения о пробе** щелкните пик посередине в районе отметки 4,82 на оси x. Щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Извлечь спектр**.

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 2. Отладка нового метода для серии

- Щелкните самый большой ион, **396,0966**. Щелкните правой кнопкой мыши в этом месте и выберите **Новое соединение**.

Чтобы точно выделить ион, удерживая правую кнопку мыши нажатой, наведите курсор на спектры и увеличьте область вокруг иона, который требуется выделить.

The screenshot shows the software interface with the 'Table of method' window open. The table contains the following data:

Проба	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
▶	Solvent_...	Solvent_Cal_...	Кал.	4	TG_Pesticides_TOF_3H...	14.04.2011 19:59

Below the table, the 'Сведения о пробе' section shows a mass spectrum plot with a peak at 396,0966. The x-axis is labeled 'Mass-to-Charge (m/z)' and ranges from 396,075 to 396,105. The y-axis is labeled 'Counts x10<sup>5</sup>' and ranges from 7,35 to 7,4. The plot shows a single sharp peak at 396,0966.

The right-click context menu is open, and the 'Новое соединение' option is highlighted with a red box.

- Введите **Tribenuron-methyl** в поле **Имя** в окне **Таблица метода**. Оставьте это соединение выделенным в таблице методов при добавлении квалификаторов на следующем шаге.
- Чтобы снова открыть спектр для **Tribenuron-methyl**, щелкните вершину пика, чтобы отобразить линию, проходящую через вершину.

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 2. Отладка нового метода для серии

- 8 Нажмите на значение **418,0776**, чтобы выбрать этот ион (синий закрашенный треугольник). Щелкните правой кнопкой мыши в этом месте и выберите **Новый квалификатор**.

Можно выбрать несколько ионов-квалификаторов.

Значение  $m/z$ , выбранное в спектре, указывается синим треугольником.

Квалификатор добавляется к таблице метода, как указано ниже.

The screenshot displays the Agilent MassHunter software interface for quantitative analysis. The main window title is "Agilent MassHunter Quantitative Analysis (для QTOF) - Метод - <C:\MassHunter\Data\LC-QTOF Pesticide\QuantResults\iii\_Test\_01.batch.bin>".

**Table of Method (Таблица метода):**

Квалификатор	Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Материнский ион	Дочерний ион	Неопределенность
1	Tribenigro...	396,0961	Скан	Целев...		0,0000	396,0961	Относительный

Квалификатор	Материнский ион	Дочерний ион	Переход	Отн. отклик	Неопределенность	Подсчет площади
	0,0000	418,0778	418,0778	28,1	20,0	<input type="checkbox"/>

**Сведения о пробе (Scan Data):**

TIC Scan Solvent\_Cal\_4.d

Scan (т. 4.828 min) Solvent\_Cal\_4.d

Mass (m/z)	Counts
417,8961	~0.5
418,0781	~1.5

**Сведения о соединении (Chromatogram):**

EIC(396,0961) Scan Solvent\_Cal\_4.d

Chromatogram showing a peak at 4.822 min.

## Задание 3. Отладка целевых соединений

С помощью этого задания вы научитесь проверять дочерние ионы и данные ВУ для нового метода количественного анализа, которые можно изменять для отдельных целевых соединений. Проверьте на предмет дочерних ионов новый метод количественного анализа, созданный в окне **Сведения о пробе**.

- 1 Чтобы проверить время удерживания, установленное на основе спектра, на вкладке **Метод** выберите **Задачи отладки метода > Отладка времени удерживания**.
- 2 В столбце **Дельта ВУ слева** введите 0, 2.
- 3 В столбце **Дельта ВУ справа** введите 0, 2.

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

Таблица метода

Временной сегмент: < <Все> > | Соединение: < Tribenuron- > | Сброс вида таблицы

Проба								
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.			
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Кал.	1	TG_Pesticides_TOF_3Hz_D...	14.04.2011 18:53			
Квантификатор								
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Tribenuron-methyl	1	396,0961	Скан	Целев...	4,822	0,200	0,200	Минуты

## Задание 4. Отладка количественного анализа

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

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

**1** На вкладке **Метод** выберите **Калибровочная кривая > Создать уровни из калибровочных проб**.

Для каждого квантификатора в окне **Таблица метода** откроется таблица **Калибровка**.

**2** Для одного из квантификаторов замените используемые по умолчанию концентрации на фактическую концентрацию для каждого уровня.

- L1 – 2,5000
- L2 – 20,0000
- L3 – 50,0000
- L4 – 100,0000

Таблица метода

Временной сегмент: < <Все> > Соединение: < Tribenuron- > Сброс вида таблицы

Проба								
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время пол			
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Кал.	1	TG_Pesticides_TOF_3Hz_D...	14.04.2011 18:53			
Квантификатор								
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Ед
Tribenuron-methyl	1	396,0961	Скан	Целев...	4,822	0,200	0,200	Ми
Калибровка								
Уровень	Конц.	Отклик						
1	2,5000							
2	20,0000							
3	50,0000							
4	100,0000							

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

#### Задание 4. Отладка количественного анализа

- 3 Выберите **Сохранить/Выйти > Валидировать**, чтобы проверить правильность параметров метода.

Внизу экрана можно увидеть все ошибки, выявленные во время валидации.

The screenshot displays the Agilent MassHunter Quantitative Analysis software interface. The main window shows the 'Метод' (Method) tab with various parameters. A 'Сведения о пробе' (Sample Information) dialog box is open, displaying a message: 'Метод валидирован. Ошибок или предупреждений не обнаружено.' (Method validated. No errors or warnings detected.) Below the dialog, the 'Сведения о соединении' (Compound Information) section shows a chromatogram with a peak at 4.822 minutes. The 'Список ошибок метода' (Method Error List) section is empty, indicating successful validation.

Проба	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Кал.	1	TG_Pesticides_TOF_3Hz_D_	14.04.2011 18.53	

Квантификатор	Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Tribenipon-methyl		1	396,0961	Скан	Целев...	4,822	0,200	0,200	Минуты

Калибровка	Уровень	Конц.	Отклик
1		2,5000	
2		20,0000	

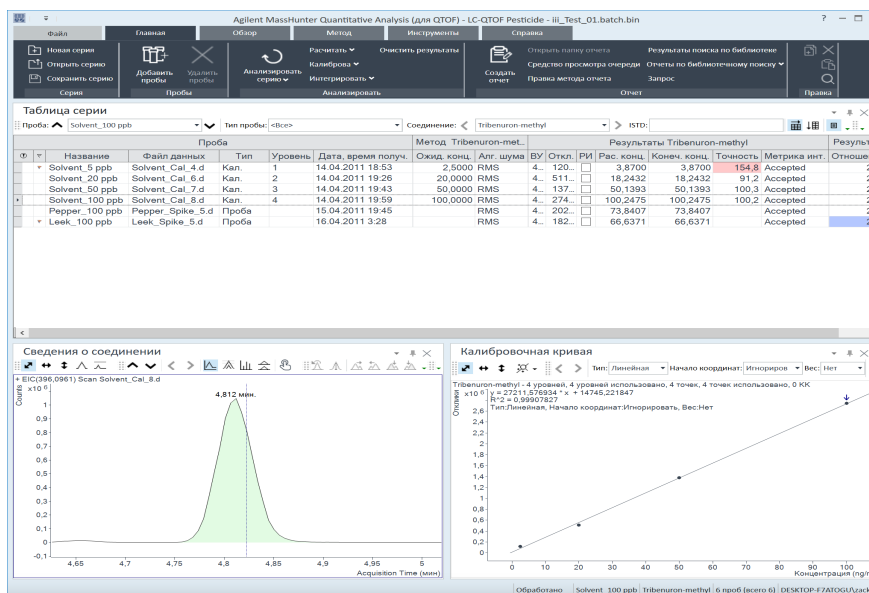
- 4 Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **ОК**.
- 5 На вкладке **Сохранить/Выйти** нажмите **Выйти**, затем выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии после применения метода** и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

### 3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF Задание 5. Анализ и сохранение метода

## Задание 5. Анализ и сохранение метода

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

1 На вкладке **Главная** щелкните **Анализировать серию**.



2 На вкладке **Главная** щелкните **Сохранить серию**.

3 Выберите **Файл > Закрывать серию**, чтобы закрыть серию.

- 3 **Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF**  
Задание 5. Анализ и сохранение метода

## Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии 42

Задание 2. Изменение макетов окна результатов 46

Задание 3. Экспорт и печать результатов 54

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

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

## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

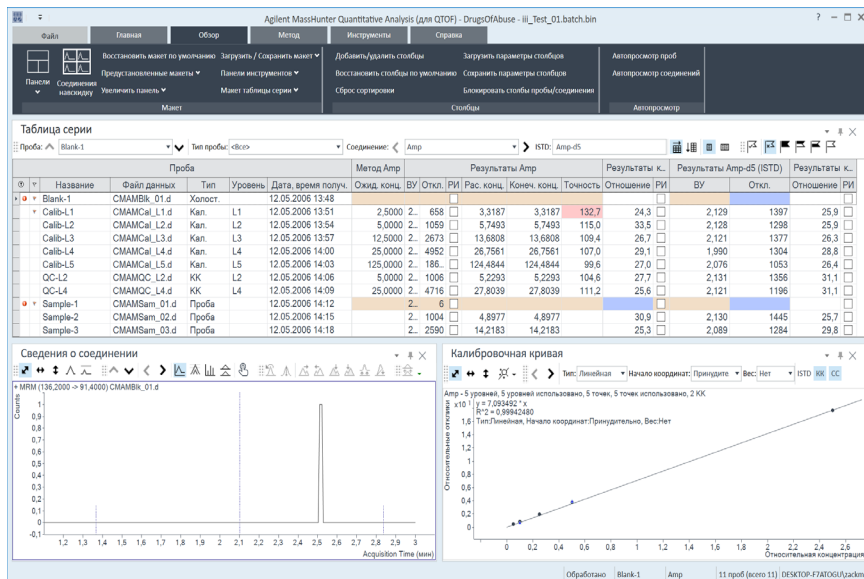
# Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

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

**Шаг 1** Откройте файл серии **iii\_Test\_01.batch.bin**, созданный в упражнении 1.

- 1 Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок **Количественный анализ** на рабочем столе.
- 2 На вкладке **Главная** щелкните **Открыть серию** для отображения диалогового окна **Открыть серию**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\DrugsOfAbuse** и щелкните файл **iii\_Test\_01.batch.bin**.


Отобразится главное представление, которое должно выглядеть так, как показано ниже. Это макет по умолчанию, который использует параметры по умолчанию для столбцов.





## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

**Шаг 2** (Необязательно) Если отображается не тот макет, что показан на рисунке на предыдущей странице...

- Если в главном представлении меньше трех окон или они расположены по-другому, восстановите макет по умолчанию.
- Если параметры столбцов отличаются, восстановите параметры столбцов, используемые по умолчанию.
- Если в окне **Сведения о соединении** помимо панели хроматограммы присутствуют другие панели, скройте их.
- Чтобы восстановить макет по умолчанию, нажмите «Восстановить макет по умолчанию» на панели инструментов, прежде чем прокручивать от одной пробы к другой.
- В пользовательском интерфейсе **Quant-My-Way** во вкладке **Вид** щелкните **Восстановить макет по умолчанию**.
- Чтобы восстановить используемые по умолчанию параметры столбцов, щелкните правой кнопкой мыши в любом месте окна **Таблица серии** и выберите пункт **Восстановить столбцы по умолчанию**.
- Чтобы скрыть лишние панели, щелкните выделенные значки, кроме значка «Показать/скрыть хроматограмму» , на панели инструментов окна сведений о соединении.
- Используемый по умолчанию макет устанавливается на заводе, и его невозможно изменить. Если нужно создать свой собственный макет, см. «**Задание 2. Изменение макетов окна результатов**» на стр. 46.

**Шаг 3** Прокручивайте от одной пробы к другой до тех пор, пока не достигнете конца окна «Таблица серии», а затем вернитесь к Cal-L5.

- 1 Щелкайте стрелку **Следующая проба**  на стандартной панели инструментов в окне таблицы серии до тех пор, пока не появится нужная проба. Проверьте изменения в окне **Сведения о соединении**.
- 2 Чтобы вернуться к пробе Cal-L5, щелкните значок **Предыдущая проба**  на стандартной панели инструментов в окне таблицы серии.
- 3 Выберите любую ячейку в строке пробы **Calib\_L4** в окне **Таблица серии**, чтобы просмотреть изменения.

Обратите внимание на взаимосвязь между выделенным файлом данных в окне **Таблица серии** и хроматограммой в окне **Сведения о соединении**.

## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

Обратите внимание на изменения сведений об амфетамине для каждой пробы в окнах **Таблица серии** и **Сведения о соединении**.

**Шаг 4** Прокручивайте от соединения к соединению, пока не просмотрите все четыре соединения.

- 1 Щелкните стрелку **Следующее соединение** или **Предыдущее соединение** на панели инструментов до тех пор, пока не отобразится нужное соединение.

Compound: < Meth >

- 2 Проверьте изменения в окнах **Таблица серии**, **Сведения о соединении** и **Калибровочная кривая**.
- 3 Щелкните раскрывающую стрелку рядом со списком **Соединение**.
- 4 Выберите **Cocaine**.

**Шаг 5** Проверьте результаты для нескольких проб.

Просмотрите ВУ для каждого соединения пробы Cal-L4.

Посмотрев результаты для всех соединений, вернитесь к просмотру результатов по кокаину.

- 1 На вкладке **Вид** выберите **Макет таблицы серии > Просмотр нескольких соединений/проб** для просмотра результатов количественного анализа всех целевых соединений.
- 2 Щелкните ячейку Cal-L4 и обратите внимание на различия **ВУ** в окне **Сведения о соединении** для каждого соединения.

Таблица серии							Результаты Amp			Результаты Meth			Результаты MDMA			Результаты Cocaine	
Проба	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	ВУ	Конеч. конц.	Точность	ВУ	Конеч. конц.	Точность	ВУ	Конеч. конц.	Точность	ВУ	Кс	
Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.			12.05.2006 13:48							2,284	1,9296		2,433		
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1		12.05.2006 13:51	2,141	3,3187	132,7	2,247	2,5936	103,7	2,276	2,2824		91,3	2,453	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2		12.05.2006 13:54	2,140	5,7493	115,0	2,248	5,1011	102,0	2,277	4,6561		93,1	2,454	
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3		12.05.2006 13:57	2,134	13,6808	109,4	2,247	15,1623	121,3	2,277	11,2728		90,2	2,459	
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4		12.05.2006 14:00	2,022	26,7561	107,0	2,228	27,2574	109,0	2,264	24,8702		99,5	2,449	
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5		12.05.2006 14:03	2,101	124,4844	99,6	2,237	124,27...	99,4	2,271	125,1668		100,1	2,448	
QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2		12.05.2006 14:06	2,142	5,2293	104,6	2,248	5,2414	104,8	2,276	4,8567		97,1	2,453	
QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4		12.05.2006 14:09	2,135	27,8039	111,2	2,246	27,7713	111,1	2,276	23,0331		92,1	2,455	
Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба			12.05.2006 14:12	2,080			2,286	3,2639		2,315	5,6138			2,408	

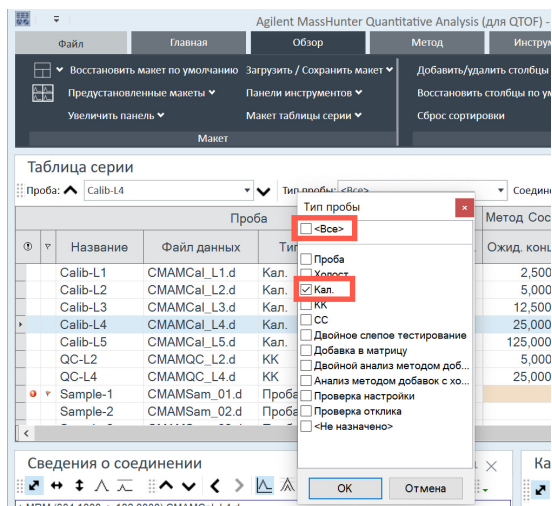
## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

- 3 На вкладке **Вид** выберите **Макет таблицы серии > Просмотр одного соединения/пробы** для возврата к просмотру подробных результатов количественного анализа выбранного целевого соединения.
- 4 При необходимости щелкните раскрывающую стрелку рядом со списком **Соединение** и выберите **Cocaine**. 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**.

**Шаг 6** Просмотрите выбранные типы проб. Отобразите только калибровочные стандарты, а затем отобразите все типы проб.

- 1 Щелкните раскрывающую стрелку возле списка **Тип пробы**. Откроется диалоговое окно **Тип пробы**.
- 2 Снимите флажок **<Все>** и установите флажок **Кал.**



- 3 Нажмите **ОК**.  
Окно **Таблица серии** должно содержать только стандарты **Кал.** для кокаина.
- 4 Щелкните раскрывающую стрелку возле списка **Тип пробы**.
- 5 Щелкните **<Все>**, затем нажмите кнопку **ОК**.  
Система установит все флажки и отобразит все типы проб.

## Задание 2. Изменение макетов окна результатов

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




**Шаг 1** С помощью значков макета на панели инструментов расположите окна «Таблица серии», «Сведения о соединении» и «Калибровочная кривая».

- 1 На вкладке **Вид** выберите **Предустановленные макеты > Таблица слева**.
- 2 На вкладке **Вид** выберите **Предустановленные макеты > Таблица справа**.
- 3 На вкладке **Вид** выберите **Предустановленные макеты > Таблица сверху**.

**Шаг 2** С помощью значков макета разверните каждое окно по отдельности:

- 1 На вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель > Развернуть таблицу**.
- 2 На вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель > Развернуть сведения о соединении**.
- 3 На вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель > Развернуть калибровку**.
- 4 Для возврата к макету по умолчанию на вкладке **Вид** щелкните **Восстановить макет по умолчанию**.

**Шаг 3** Смените панели в окне «Сведения о соединении» для Cal-L4.

- 1 В окне **Таблица серии** выберите строку **Cal-L4**.
- 2 На панели инструментов окна **Сведения о соединении** щелкните значок **Показать/скрыть квалификаторы** .
- 3 Щелкните значок **Показать/скрыть спектр** .
- 4 Щелкните значок **Показать/скрыть внутренний стандарт** . Макет и результаты будут выглядеть так, как на следующем рисунке.

## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

На этом шаге предполагается, что данная задача начата, когда в окне **Сведения о соединении** только панель хроматограммы.

The screenshot displays the Agilent MassHunter Quantitative Analysis interface. At the top, there is a menu bar with options like 'Файл', 'Главная', 'Обзор', 'Метод', 'Инструменты', and 'Справка'. Below the menu is a toolbar with various icons for file management and analysis. The main window is divided into several panels:

- Таблица серии (Table Series):** A table showing analysis results for five calibration samples (Calib-L1 to Calib-L5). The table includes columns for sample name, file path, type, level, acquisition date/time, expected concentration, and various results (BU, RI, etc.).
- Сведения о соединении (Compound Information):** A panel showing chromatograms for different levels of Cocaine. A red box highlights the 'Хроматограмма' (Chromatogram) icon in the toolbar. The chromatograms show peaks at retention times of 2.448, 3.071, and 2.448 minutes.
- Калибровочная кривая (Calibration Curve):** A graph showing the relationship between relative concentration and relative response for Cocaine. The curve is linear, with the equation  $y = 5.550779 \cdot x$  and  $R^2 = 0.99985846$ .

At the bottom of the window, there is a status bar indicating 'Обработано Calib-L4 Cocaine 5 проб (всего 11) DESKTOP-F7ATOGU\zackm'.

Изменения макета влияют только на положение и видимость шести панелей. Изменение макета не влияет на панели в окне **Сведения о соединении**.

**Шаг 4** Сохраните используемый по умолчанию макет без калибровочной кривой.

**5** Закройте окно **Калибровочная кривая**.

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

Откроется диалоговое окно **Сохранить файл макета**.

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

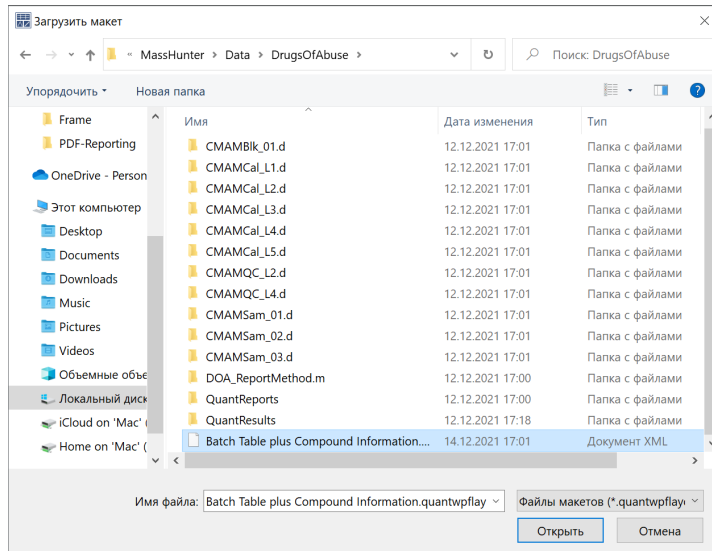
## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

**Шаг 5** Загрузите вновь созданный макет.

- 1 На вкладке **Вид** щелкните **Восстановить макет по умолчанию**.
- 2 На вкладке **Вид** выберите **Загрузить/сохранить макет > Загрузить макет**.

Откроется диалоговое окно **Загрузить макет**.



## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

- 3 Щелкните файл **Таблица серии** и **Сведения о соединении** и нажмите кнопку **Открыть**.

Теперь окно результатов должно выглядеть как на **Рис. 7** на стр. 49.

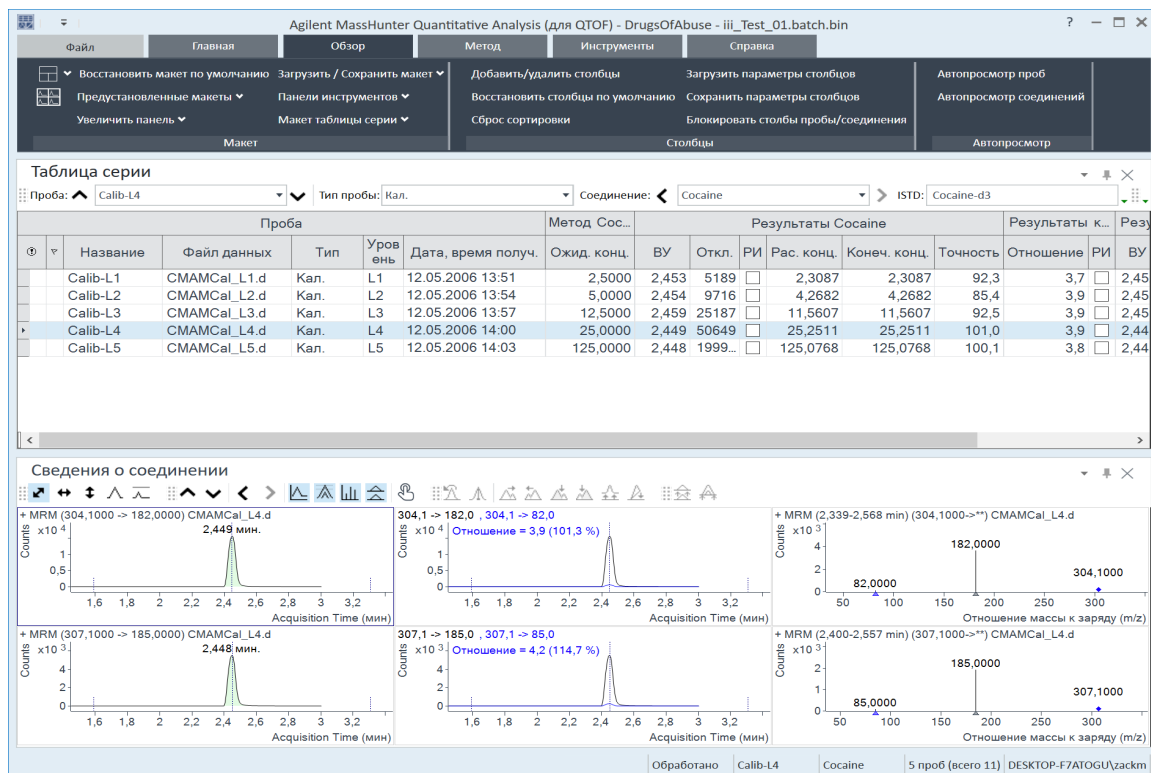


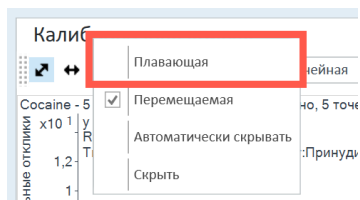
Рис. 7. Окно результатов

#### 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

##### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

**Шаг 6** Создайте макет, как показано на **Рис. 8** на стр. 51.

- 1 Восстановите макет по умолчанию (на вкладке **Вид** щелкните **Восстановить макет по умолчанию**).
- 2 Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Калибровочная кривая** и установите флажок **Плавающее**.



- 3 Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Сведения о соединении** и установите флажок **Плавающее**.
- 4 Измените размер окон в соответствии с макетом на **Рис. 8**.

## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

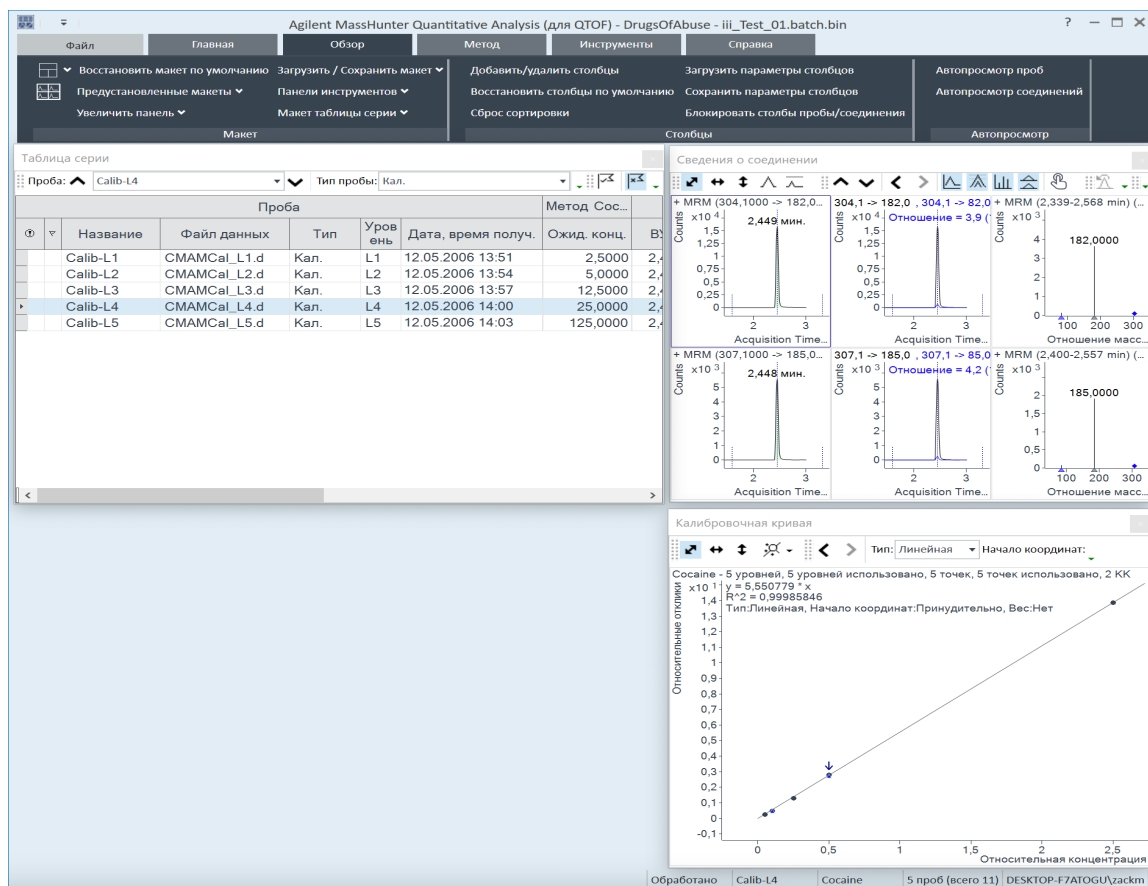


Рис. 8. Отображение с плавающими окнами калибровочной кривой и сведений о соединении

- Щелкните правой кнопкой мыши заголовок окна **Сведения о соединении** и установите флажок **Стыкуемое**.

#### 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

##### Задание 2. Изменение макетов окна результатов

6 Измените размер окон в соответствии с макетом на **Рис. 9**.

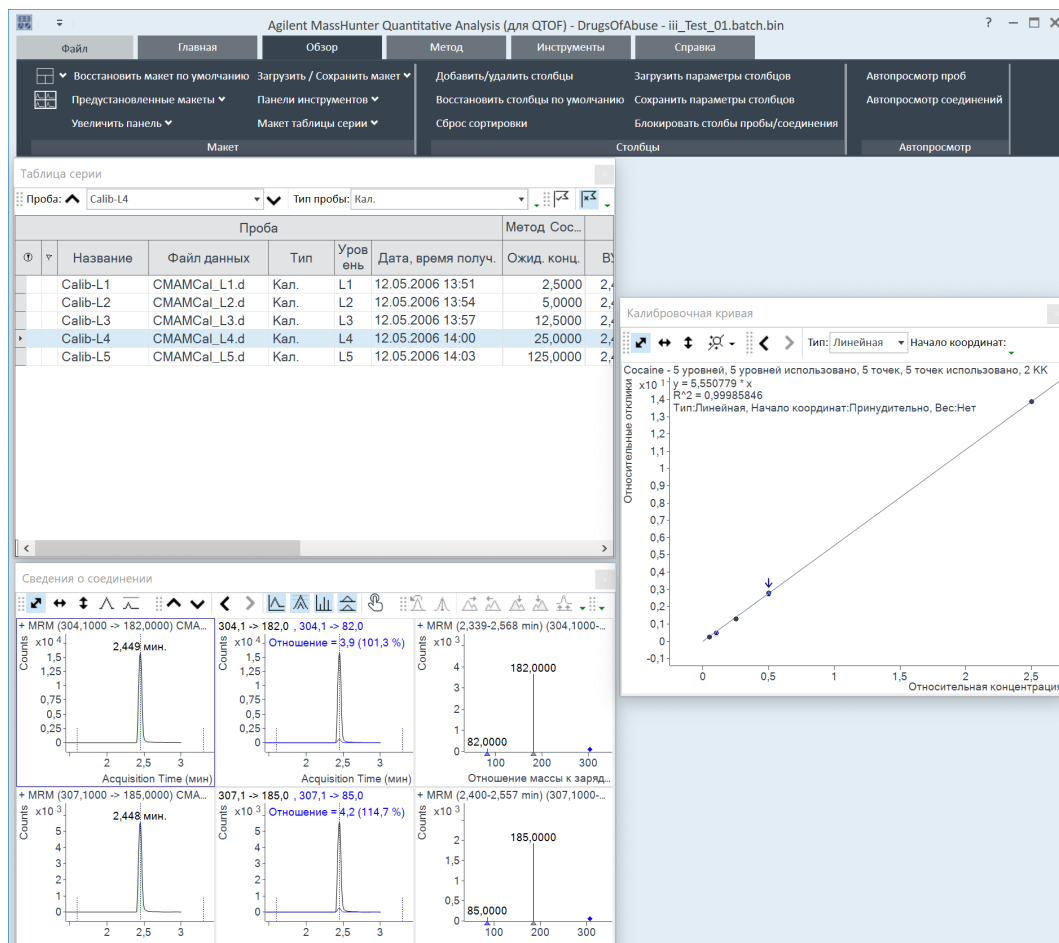


Рис. 9. Окно измененного размера

- Щелкните правой кнопкой мыши заголовок окна **Калибровочная кривая** и установите флажок **Стыкуемое**.
- Переместите окно **Сведения о соединении** таким образом, чтобы макет соответствовал показанному на рисунке в начале задачи.

#### 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

**Шаг 7** Воссоздайте (не восстанавливайте) макет по умолчанию.

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

## Задание 3. Экспорт и печать результатов

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

**Шаг 1** Экспортируйте файл серии `iii_Test_01`.

- 1 Чтобы активировать окно **Таблица серии**, щелкните его строку заголовка.
- 2 Щелкните правой кнопкой в окне **Таблица серии** и выберите **Экспорт таблицы**.
- 3 В качестве каталога назначения выберите **Мои документы**.
- 4 Для файла экспорта введите имя `iii_Test_01.xlsx`.
- 5 Нажмите кнопку **Сохранить**. Автоматически откроется файл Excel `My Documents\iii_Test_01.xlsx`, где `iii` = инициалы пользователя

#### 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 3. Экспорт и печать результатов

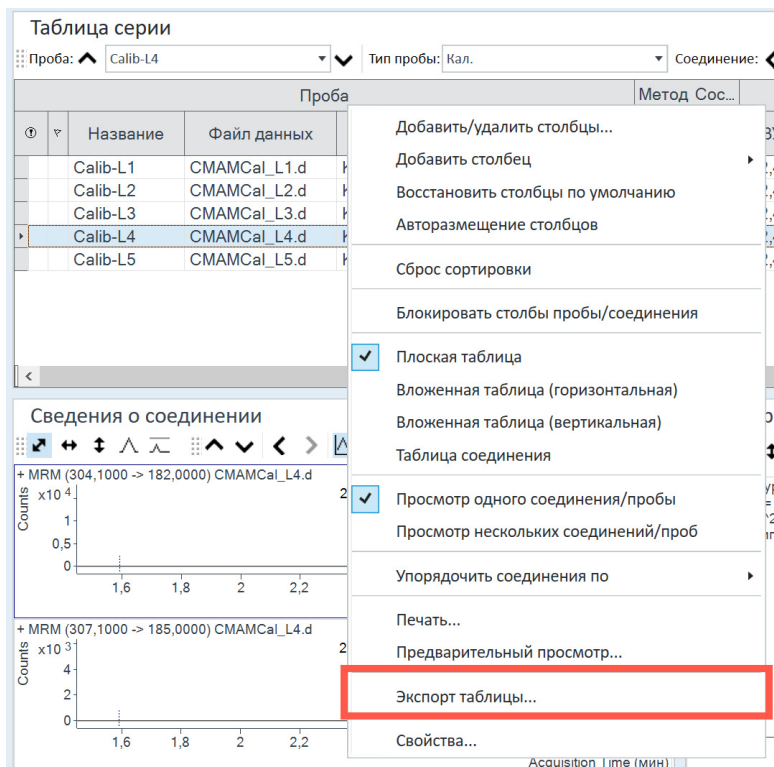


Рис. 10. Экспорт результатов

## 4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

### Задание 3. Экспорт и печать результатов

**Шаг 2** Посмотрите результаты серии в том виде, как они выглядят в Excel, затем выйдите из Excel.

- 1 Обратите внимание на то, какие данные экспортируются, а какие нет.
- 2 По завершении закройте Excel.

Проба					Метод Sosaine		Результаты Sosaine									
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.	ВУ	Откл. РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Отношения	РИ	ВУ	Откл.	Отношения	РИ
Calib-L1	СМAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5	2,4526167	5188,637 ####	2,308652511	2,308652511	92,34610043	3,718095634 ####	2,45203	20244,7	4,006281225 ####		
Calib-L2	СМAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5	2,454	9716,416 ####	4,26823458	4,26823458	85,36469159	3,897332136 ####	2,45343	20505,7	4,029412344 ####		
Calib-L3	СМAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5	2,4589833	25186,36 ####	11,56066094	11,56066094	92,4852875	3,911927296 ####	2,45857	19624,9	4,392766627 ####		
Calib-L4	СМAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25	2,4487167	50648,7 ####	25,251111	25,251111	101,004444	3,85453605 ####	2,44823	18067,7	4,229091938 ####		
Calib-L5	СМAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125	2,4481833	199965,7 ####	125,0768093	125,0768093	100,0614474	3,801425946 ####	2,44792	14401,1	3,710135618 ####		

Рис. 11. Таблица серии в Excel

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

- 1 В программе Excel выберите **Файл > Печать**.
- 2 Проверьте изображение в окне **Предварительный просмотр печати**, чтобы убедиться в том, что оно выглядит нужным образом.
- 3 Выберите **Файл > Печать**.
- 4 Повторите шаги **шаг 1 – шаг 5** в «Экспортируйте файл серии iii\_Test\_01.» на стр. 54 для сведений о соединении.
- 5 Если не нужно переходить к упражнению 4, щелкните на вкладке «Главная» **Сохранить серию**.
- 6 Выберите **Файл > Выход**.  
Окно **Таблица серии** можно распечатать также из программы **Предварительный просмотр печати**, выбрав **Файл > Печать** в меню программы **Предварительный просмотр печати**.

## Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой 58

Задание 2. Непараметрическое интегрирование 61

Задание 3. Обнаружение выбросов 75

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



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

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

## Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой

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

**Шаг 1** При необходимости откройте файл серии **iii\_Test\_01.batch.bin**.

- 1 Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок **Количественный анализ (QQQ)**  на рабочем столе.
- 2 На вкладке **Главная** щелкните **Открыть серию**  для отображения диалогового окна **Открыть серию**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\DrugsOfAbuse** и щелкните файл **iii\_Test\_01.batch.bin**.

Эту программу также можно запустить, щелкнув **Программы > Agilent MassHunter Quantitative > Quantitative Analysis (QQQ)** в меню Пуск.

При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию** перед открытием серии.

**Шаг 2** Найдите выброс за пределы точности для амфетамина и измените аппроксимацию кривой.

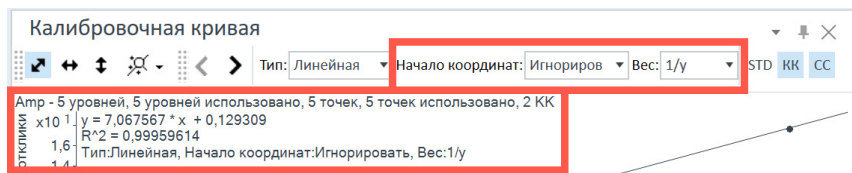
- 1 Убедитесь, что в окне **Таблица серии** задан режим отображения одного соединения и в качестве целевого соединения отображается **Amp**. См. фрагмент рисунка внизу.

Соединение: < Amp > ISTD: Amp-d5 

- 2 Установите курсор в ячейку на пересечении строки **Calib-L1** и столбца **Точность**, чтобы отобразить сообщение о выбросе, показанное ниже. Ячейки с выбросами могут быть окрашены в красный цвет (вверх) или синий цвет (вниз).
- 3 В окне **Калибровочная кривая** установите для параметра **Начало координат** значение **Игнорировать**, а для параметра **Вес** — **1/y**. Программа выведет на экран новую формулу аппроксимации кривой и значение  $R^2$ .

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой




#### Начало координат аппроксимации кривой

- **Принудительно** — линия аппроксимации кривой принудительно проходит через начало координат ( $X=0, Y=0$ ).
- **Игнорировать** — не требуется, чтобы линия аппроксимации кривой использовала начало координат ( $X = 0, Y = 0$ ).

#### Вес аппроксимации кривой

- **Нет** — присвоение одинакового веса всем точкам данным.
- **1/Y** — применение формулы  $1/Y$  к точкам данных. Эта формула снижает влияние высоких значений  $Y$  и усиливает влияние низких значений  $Y$ .

**Шаг 3** Выполните анализ серии и проверьте результаты в окне «Таблица серии».

- 1 На вкладке **Главная** щелкните **Анализировать серию**  для анализа серии.
- 2 После анализа серии проверьте результаты в окне **Таблица серии**.

Точность
96,6
97,1
102,5
103,8
99,2
86,7
108,0

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой

**Шаг 4** Найдите выбросы за пределы точности, если таковые есть, для других соединений.

- 1 Щелкните значок **Следующее соединение** на панели инструментов **Таблица серии** ➤, чтобы просмотреть отдельные соединения, такие как кокаин, MDMA и метамфетамин.
- 2 Изучите результаты количественного анализа, в частности значения в столбце **Точность**.  
Обратите внимание на то, что значение точности для стандарта Calib-L3 метамфетамина выходит за пределы указанного диапазона.

**Шаг 5** Измените аппроксимацию кривой для метамфетамина и выполните анализ серии.

- 1 В окне **Аппроксимация калибровочной кривой** установите для параметра **Начало координат** значение **Игнорировать**, а для параметра **Вес** — **1/y**.  
Программа Quantitative Analysis выведет на экран пересмотренную формулу аппроксимации кривой и значение  $R^2$ .
- 2 На вкладке **Главная** щелкните **Анализировать серию** для анализа серии.  
После анализа серии в окне **Таблица серии** отобразятся новые результаты.

## Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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

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

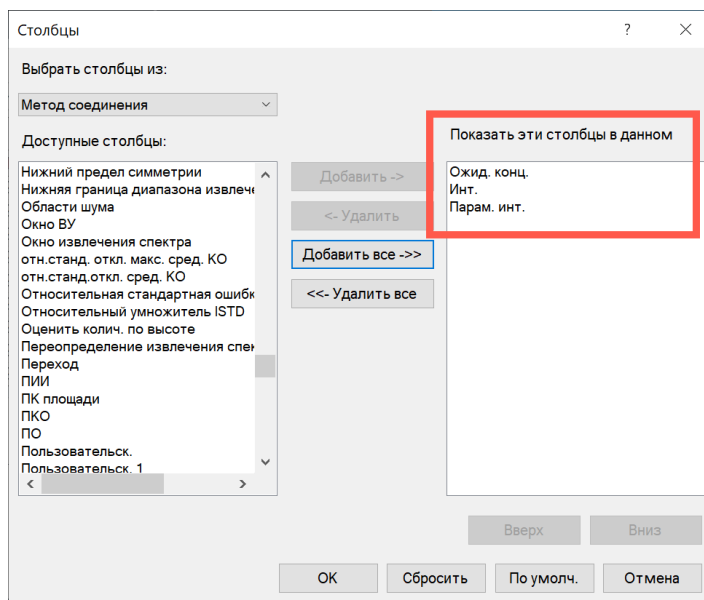
**Шаг 1** Добавлять столбцы интегрирования в таблицу серии.

- 1 Щелкните правой кнопкой мыши в окне **Таблица серии** и выберите **Добавить/удалить столбцы**.  
Откроется диалоговое окно **Столбцы**.
- 2 Выберите пункт **Метод соединения** в раскрывающемся списке **Выбрать столбцы из**.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 3 В списке **Доступные столбцы** выберите **Инт.** (тип интегратора) и **Парам. инт.** (параметры интегратора) и нажмите кнопку **Добавить**. Программа Quantitative Analysis переместит выбранные столбцы в список **Показывать эти столбцы в данном порядке**.
  - В этой задаче предполагается, что серия *iii\_Test\_01* уже открыта. В противном случае см. **шаг 1** в «**Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой**» на стр. 58.

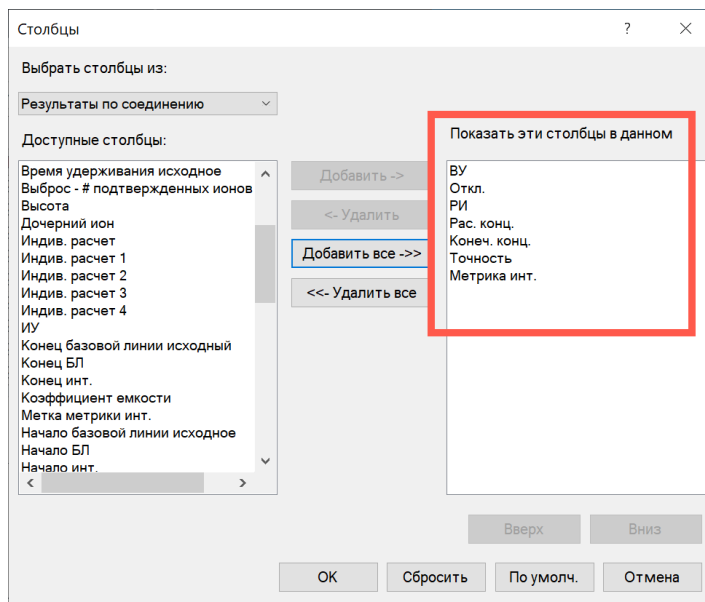


- 4 Выберите пункт **Результаты по соединению** в раскрывающемся списке **Выбрать столбцы из**.
- 5 Выберите **Метрика инт.** (метрика интегратора) в списке **Доступные столбцы** и нажмите кнопку **Добавить**. Система переместит выбранный столбец в список **Показывать эти столбцы в данном порядке**.


## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

6 Нажмите **ОК**.



**Шаг 2** Просмотрите используемые по умолчанию значения интегрирования для амфетамина.

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

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

Инт.	Парам. инт.
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	
МС-МС	

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 3 Рассмотрите используемые по умолчанию значения в столбце «Метрика инт.» в окне «Таблица серии».

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

Метод Amp			Результаты Amp						
Ожид. конц.	Инт.	Парам. инт.	ВУ	Откл.	РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метрика инт.
МС-МС					<input type="checkbox"/>				
2,5000	МС-МС		2,141	658	<input type="checkbox"/>	2,4161	2,4161	96,6	Accepted
5,0000	МС-МС		2,140	1059	<input type="checkbox"/>	4,8556	4,8556	97,1	Accepted
12,5000	МС-МС		2,134	2673	<input type="checkbox"/>	12,8162	12,8162	102,5	Accepted
25,0000	МС-МС		2,022	4952	<input type="checkbox"/>	25,9394	25,9394	103,8	Accepted
125,0000	МС-МС		2,101	18605	<input type="checkbox"/>	124,0262	124,0262	99,2	Accepted
5,0000	МС-МС		2,142	1006	<input type="checkbox"/>	4,3336	4,3336	86,7	Accepted
25,0000	МС-МС		2,135	4716	<input type="checkbox"/>	26,9911	26,9911	108,0	Accepted
МС-МС			2,080	6	<input type="checkbox"/>				Rejected
МС-МС			2,143	1004	<input type="checkbox"/>	4,0008	4,0008		Accepted
МС-МС			2,105	2590	<input type="checkbox"/>	13,3556	13,3556		Accepted

### Шаг 3 Просмотрите ошибки для кокаина и MDMA.

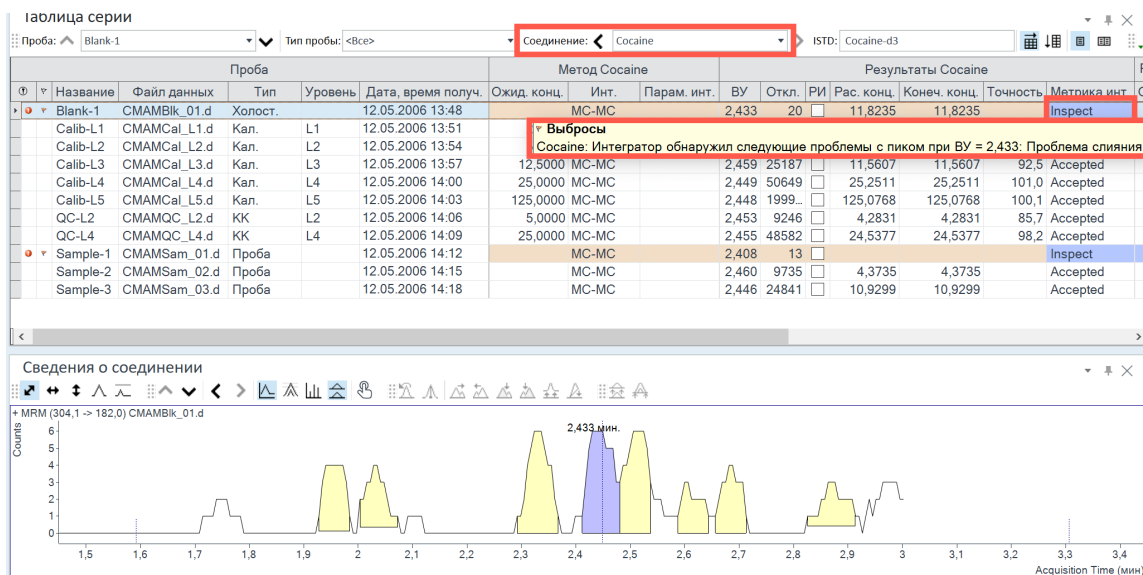
Найдите сообщения о выбросе на пересечении столбца **Метрика инт.** и строки пробы **Blank-1**.

- 1 Закройте окно **Калибровочная кривая**.
- 2 Увеличьте относящуюся к хроматограмме часть панели управления окна сведений о соединении, чтобы отображались только хроматограммы квантификатора и квалификатора. Щелкните значок **Показать/скрыть спектр**.
- 3 Также щелкните значок **Показать/скрыть внутренний стандарт**.
- 4 Щелкните по значку **Следующее соединение** на панели инструментов в окне **Таблица серии** > до тех пор, пока не появится соединение **Cocaine**.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- Выберите строку **Blank-1** и наведите курсор на слово **Проверка** в столбце **Метрика инт.** в этой строке. Отобразятся все сообщения о выбросах для этих данных, а также интегрированная хроматограмма для кокаина.



- На стандартной панели инструментов окна таблицы серии щелкните значок **Следующее соединение** > или значок «Предыдущая серия» < до тех пор, пока не отобразится соединение MDMA.
- Выберите строку **Blank-1** и установите курсор на столбец **Метрика инт.** Отобразятся все сообщения о выбросах для этих данных, а также интегрированная хроматограмма для MDMA.

В сообщении о выбросе говорится: «MDMA: Интегратор обнаружил следующие проблемы с пиком при ВУ = 2,4664: Проблема с помехами».

Обратите внимание на то, что для метрик интегрирования используются следующие цвета:


- Зеленый — принято
- Синий — проверить
- Красный — отклонено

Эта цвета используются также для пиков.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

#### Шаг 4 Смените алгоритм шума.

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

Метод Amp				Результаты Amp							Результаты
Ожид. конц.	Инт.	Парам. инт.	Алг. шума	ВУ	Откл.	Р/И	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метрика инт.	Отношение
2,5000	MC-MC		RMS	2,141	658	<input type="checkbox"/>	2,4161	2,4161	96,6	Accepted	24,3
5,0000	MC-MC		RMS	2,140	1059	<input type="checkbox"/>	4,8556	4,8556	97,1	Accepted	33,5
12,5000	MC-MC		RMS	2,134	2673	<input type="checkbox"/>	12,8162	12,8162	102,5	Accepted	26,7
25,0000	MC-MC		RMS	2,022	4952	<input type="checkbox"/>	25,9394	25,9394	103,8	Accepted	29,1
125,0000	MC-MC		RMS	2,101	18605	<input type="checkbox"/>	124,0262	124,0262	99,2	Accepted	27,0
5,0000	MC-MC		RMS	2,142	1006	<input type="checkbox"/>	4,3336	4,3336	86,7	Accepted	27,7
25,0000	MC-MC		RMS	2,135	4716	<input type="checkbox"/>	26,9911	26,9911	108,0	Accepted	25,6
	MC-MC		RMS	2,080	6	<input type="checkbox"/>				Rejected	
	MC-MC		RMS	2,143	1004	<input type="checkbox"/>	4,0008	4,0008		Accepted	30,9
	MC-MC		RMS	2,105	2590	<input type="checkbox"/>	13,3556	13,3556		Accepted	25,3

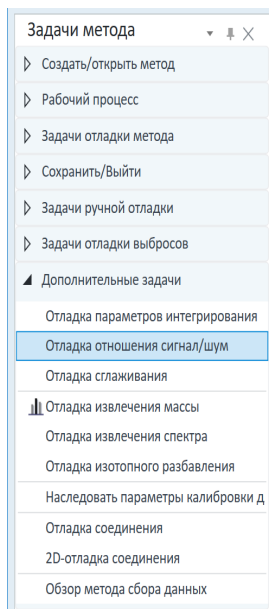
#### Шаг 5 Для тренировки поменяйте в методе алгоритм шума с RSM на ASTM для амфетамина. Выйдите, но не сохраняйте метод.

- На вкладке **Метод** щелкните **Правка** для переключения в режим редактирования метода.

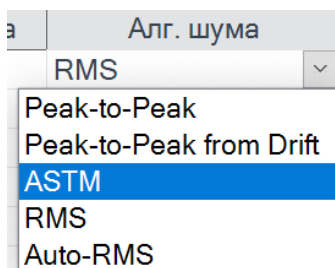
## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 2 В столбце **Задачи метода** выберите **Дополнительные задачи > Отладка отношения сигнал-шум**.  
В окне **Таблица метода** отобразятся параметры интегратора.



- 3 В **таблице метода** щелкните раскрывающую стрелку возле столбца **Алг. шума** для амфетамина.  
Отобразится список имеющихся алгоритмов шума.
- 4 Выберите **ASTM**.



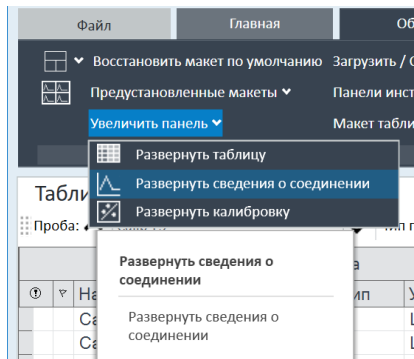
- 5 В окне **Задачи метода/Сохранить/Выйти** нажмите кнопку **Выход**.
- 6 Щелкните **Нет** в ответ на вопрос **Применить этот метод к серии?**.  
Система отобразит режим анализа серии.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

**Шаг 6** Отключите базовую линию (стандарт наивысшей концентрации), затем снова включите ее для амфетамина. Сравните две хроматограммы: одна при включенной, другая при выключенной базовой линии.

- 1 Выберите пробу **Calib-L5** (если она еще не выбрана), а затем на вкладке **Вид** выберите **Развернуть панель > Развернуть сведения о соединении..**



Убедитесь, что в окне видна только панель сведений о соединении.

Обратите внимание на то, что для хроматограммы квантификатора базовая линия нарисована по умолчанию.

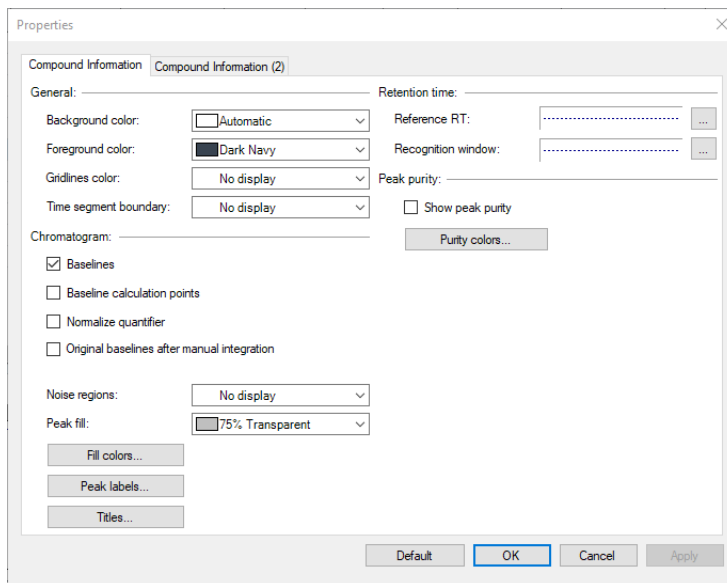
Таблица серии							
Проба:		Calib-L5	Тип пробы:		<Все>		
Проба						Метод A	
		Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. ко
		Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48	
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5,0
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25,0
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125,0
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12	
		Sample-2	CMAMSam_02.d	Проба		12.05.2006 14:15	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	Проба		12.05.2006 14:18	

- 2 Щелкните правой кнопкой мыши одну из двух хроматограмм, чтобы открыть контекстное меню.

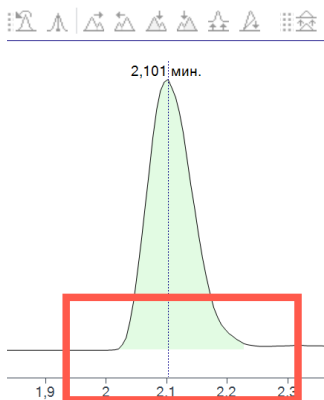
## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 3 Выберите пункт **Свойства** внизу контекстного меню, чтобы открыть диалоговое окно **Свойства**.



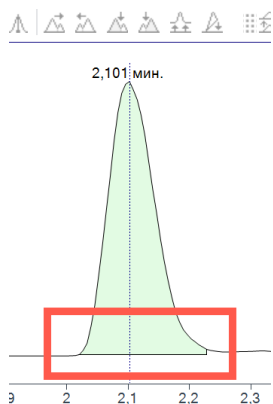
- 4 В диалоговом окне **Свойства** снимите флажок «Базовые линии».
- 5 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на пик без базовой линии. Обратите внимание на то, что после снятия флажка базовых линий они исчезают.



- 6 В диалоговом окне **Свойства** установите флажок **Базовые линии**.

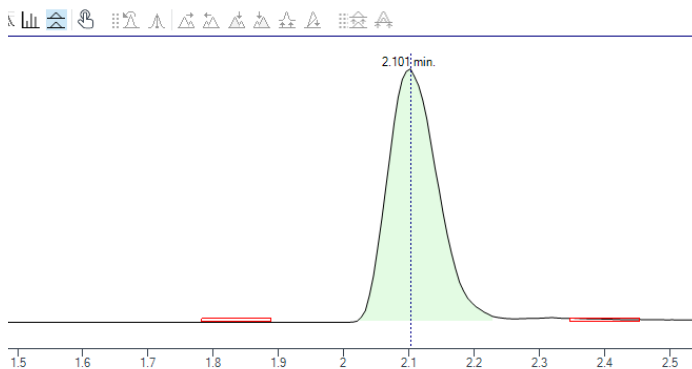
5 **Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов**  
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

7 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на пик с базовой линией.



**Шаг 7** Проверьте точки расчета базовой линии для амфетамина.

- 1 В диалоговом окне **Свойства** установите флажок **Точки расчета базовой линии**.
- 2 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите, где начинается и заканчивается базовая линия.



- 3 В диалоговом окне **Свойства** снимите флажок **Точки расчета базовой линии**.
- 4 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на хроматограммы.

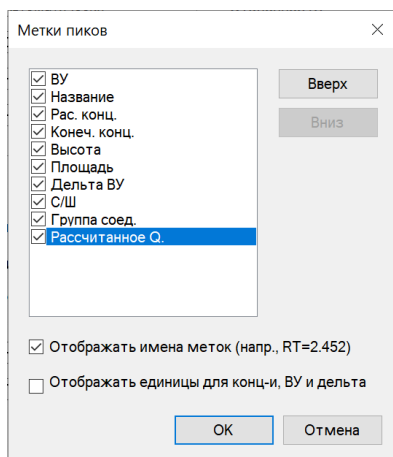
## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

5 Сравните хроматограммы с точками расчета базовой линии и без них.

**Шаг 8** Отобразите метки пика для амфетамина.

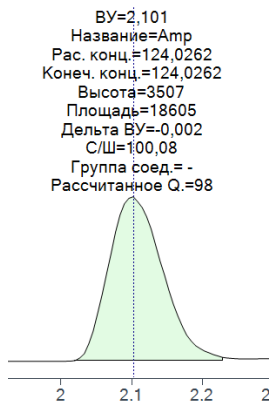
- 1 В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Метки пиков**.  
Откроется диалоговое окно **Метки пиков**.
- 2 Установите все флажки **Метки пиков** и флажок **Отображать имена меток**.
- 3 Нажмите **ОК**.



## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

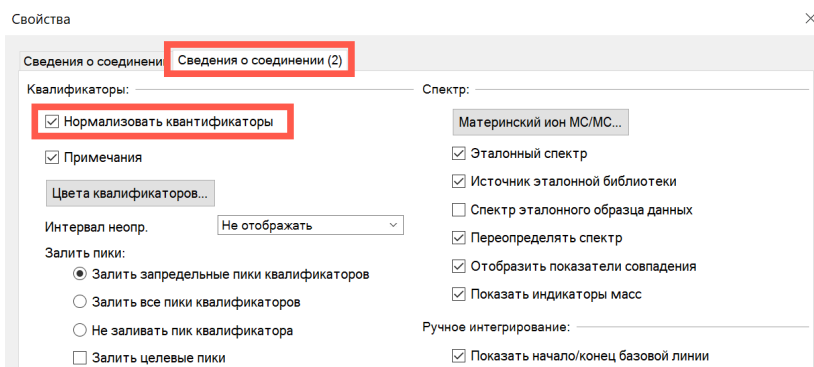
- 4 В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Применить**. Теперь метки пика должны совпадать с теми, что показаны в приведенном ниже примере.



- 5 В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Метки пиков**. Откроется диалоговое окно **Метки пиков**.
- 6 Снимите все флажки **Метки пиков**, кроме **ВУ** (время удерживания). Снимите флажок **Отображать имена меток** и нажмите кнопку **ОК**.
- 7 В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Применить** и посмотрите, как изменились метки пика.

**Шаг 9** Отобразите справа хроматограмму квалификатора до и после нормализации.

- 1 Перейдите на вкладку **Сведения о соединении (2)**. Установите флажок **Нормализовать** в разделе **Квалификаторы**.

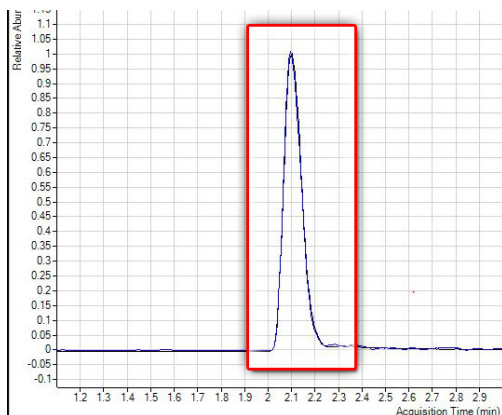


## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

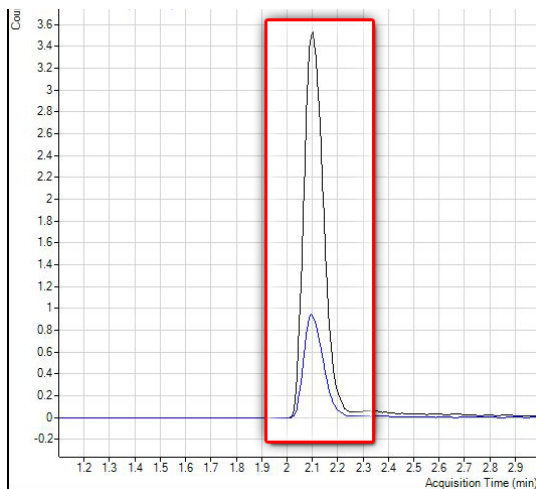
### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 2 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите, что теперь эти два пика сливаются и отображаются как один пик.

Для версии V.04.01 и выше: Обратите внимание на то, что по умолчанию отображается нормализованный пик квалификатора, наложенный на пик квантификатора.



- 3 В диалоговом окне **Свойства** снимите флажок **Нормализовать квалификаторы**.
- 4 Нажмите кнопку **Применить**, чтобы снова отобразить второй пик квантификатора для квалификатора.

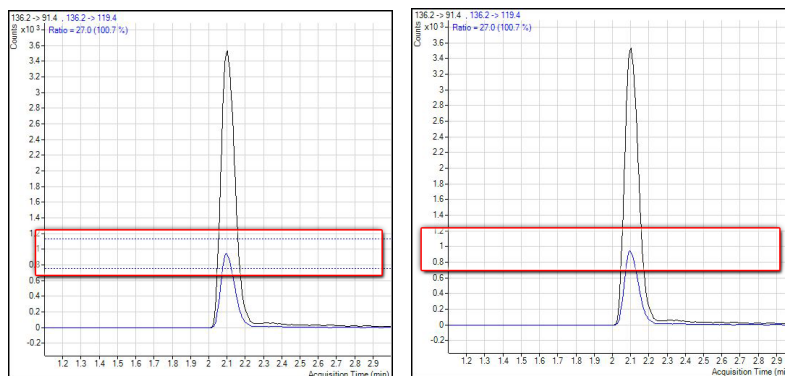


## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 2. Непараметрическое интегрирование

**Шаг 10** Просмотрите интервал неопределенности.

- 1 В раскрывающемся меню поля **Интервал неопределенности** диалогового окна **Свойства** выберите тип интервала неопределенности, который хотите отображать. Нажмите кнопку **Применить**, и на хроматограмме квалификатора появится интервал неопределенности.
- 2 В раскрывающемся меню **Интервал неопределенности** диалогового окна **Свойства** выберите пункт **Не отображать**. Нажмите кнопку **Применить**, чтобы убрать интервал неопределенности с хроматограммы.
- 3 Нажмите кнопку **ОК**, чтобы закрыть диалоговое окно **Свойства**.
- 4 Сравните хроматограмму квалификатора с **интервалом неопределенности** и без него.  
Интервал неопределенности представляет собой указанный пунктирными линиями диапазон, который показывает верхнюю и нижнюю границы интенсивности квалификатора.



**Шаг 11** Удалите столбцы **Инт.** и **Парам. инт.** из окна **Таблица серии**.

- 1 На вкладке **Вид** щелкните **Восстановить макет по умолчанию**.
- 2 Щелкните правой кнопкой мыши в разделе **Метод соединения** окна **Таблица серии** и выберите **Добавить/удалить столбцы**.
- 3 В списке справа выберите **Инт.** и **Парам. инт.** (методы соединения).
- 4 Нажмите кнопку **Удалить**, затем кнопку **ОК**.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 3. Обнаружение выбросов

# Задание 3. Обнаружение выбросов

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

**Шаг 1** Просмотрите сведения о выбросах для MDMA.

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

The screenshot displays the Agilent MassHunter Quantitative Analysis interface. The main window shows a table of series for MDMA. The 'Blank-1' row is selected, and the 'WU' (Weighted Units) column is highlighted. Below the table, the 'Connection Information' window shows chromatograms for the selected peak at 2.284 minutes, with a signal-to-noise ratio of 150.8 (1576.5%). The 'Calibration Curve' window shows a linear fit for MDMA with the equation  $y = 6.827311 \cdot x$  and  $R^2 = 0.99984076$ .

Проба						Метод MDMA			Результаты MDMA					
Ид.	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.	Алг. шума	ВУ	Откл.	PI	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метр
	Blank-1	CMAMBik_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48		RMS	2,284	7		1,9296	1,9296		Ассе
	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5000	RMS	2,276	3794		2,2824	2,2824	91,3	Ассе
	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5,0000	RMS	2,277	7433		4,6561	4,6561	93,1	Ассе
	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5000	RMS	2,277	17023		11,2728	11,2728	90,2	Ассе
	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25,0000	RMS	2,264	33212		24,8702	24,8702	99,5	Ассе
	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125,0000	RMS	2,271	1101...		125,1668	125,1668	100,1	Ассе
	QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0000	RMS	2,276	7253		4,8567	4,8567	97,1	Ассе
	QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0000	RMS	2,276	31464		23,0331	23,0331	92,1	Ассе
	Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12		RMS	2,315	476		5,6138	5,6138		Ассе
	Sample-2	CMAMSam_02.d	Проба		12.05.2006 14:15		RMS	2,280	7651		5,1778	5,1778		Ассе
	Sample-3	CMAMSam_03.d	Проба		12.05.2006 14:18		RMS	2,267	16710		10,7772	10,7772		Ассе

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 3. Обнаружение выбросов

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

Таблица серии

Проба: Blank-1 Тип пробы: <Все> Соединение: MDMA ИSTD: MDMA-d5

Проба				Метод MDMA				Результаты MDMA				Результаты к...		Результат...		Результаты к...					
№	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.	Алг. шума	ВУ	Откл.	РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метрика инт.	Отношение	РИ	ВУ	Откл.	Отношение	РИ	
Blank-1	Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48		RMS	2,284	7		1,9296	1,9296		Accepted	150,8		2,602	28			
Calib-L1	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кап.	L1	12.05.2006 13:51	2,5000	RMS	2,276	3794		2,2824	2,2824	91,3	Accepted	10,2		2,275	121...		25,2	
Calib-L2	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кап.	L2	12.05.2006 13:54	5,0000	RMS	2,277	7433		4,6561	4,6561	93,1	Accepted	11,0		2,275	116...		23,0	
Calib-L3	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кап.	L3	12.05.2006 13:57	12,5000	RMS	2,277	17023		11,2728	11,2728	90,2	Accepted	10,0		2,276	110...		24,2	
Calib-L4	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кап.	L4	12.05.2006 14:00	25,0000	RMS	2,264	33212		24,8702	24,8702	99,5	Accepted	9,6		2,262	9780		24,8	
Calib-L5	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кап.	L5	12.05.2006 14:03	125,0000	RMS	2,271	1101...		125,1668	125,1668	100,1	Accepted	9,6		2,268	6444		22,5	
QC-L2	QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0000	RMS	2,276	7253		4,8567	4,8567	97,1	Accepted	9,6		2,274	109...		23,9	
QC-L4	QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0000	RMS	2,276	31464		23,0331	23,0331	92,1	Accepted	9,1		2,274	100...		23,5	
Sample-1	Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12		RMS	2,315	476		5,6138	5,6138		Accepted	12,6		2,314	62		27,5	
Sample-2	Sample-2	CMAMSam_02.d	Проба		12.05.2006 14:15		RMS	2,280	7651		5,1778	5,1778		Accepted	10,4		2,278	108...		25,1	
Sample-3	Sample-3	CMAMSam_03.d	Проба		12.05.2006 14:18		RMS	2,267	16710		10,7772	10,7772		Accepted	9,8		2,266	113...		23,8	

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

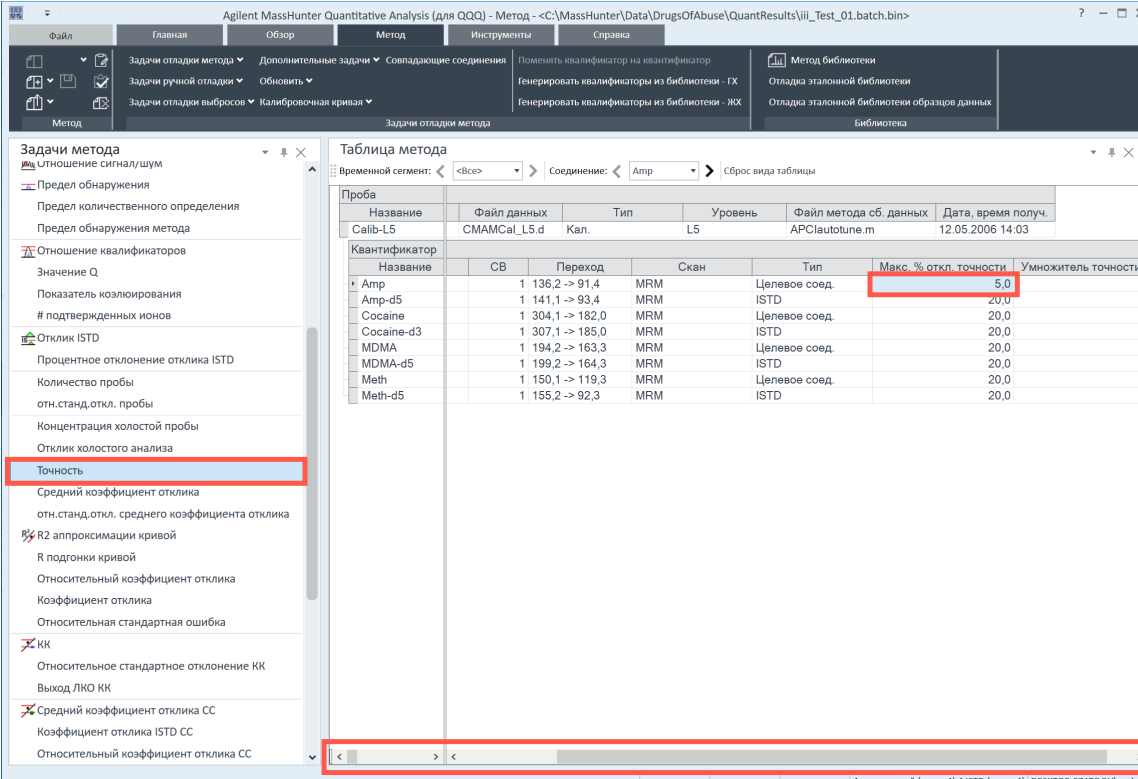
- Щелкните значок **Предыдущее соединение** на панели инструментов < до появления соединения **Amp**.
- Выберите в таблице строку **Calib-L5**.
- На вкладке **Метод** щелкните **Правка** для переключения в режим редактирования метода.
- В столбце **Задачи метода** щелкните **Задачи отладки выбросов > Точность**.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 3. Обнаружение выбросов

- 5 Установите параметр **Макс. % откл. точности**, равным **5 %** для **Amp**.

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



The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window is titled "Agilent MassHunter Quantitative Analysis (для QQQ) - Метод - <C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantResults\iii\_Test\_01.batch.bin>". The "Method Table" window is open, showing a table of method parameters. The table is split into two panes. The left pane shows the "Method Tasks" list, and the right pane shows the "Method Table" data. The "Accuracy" parameter is highlighted in the left pane, and the "Max. % of accuracy" value of 5.0 is highlighted in the right pane.

Имя	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.	
Calib-L5	CMAMCaI_L5.d	Кал.	L5	APCIautotune.m	12.05.2006 14:03	
Квантификатор						
Имя	СВ	Переход	Скан	Тип	Макс. % откл. точности	Умножитель точности
Amp	1	136,2 -> 91,4	MRM	Целевое соед.	5,0	
Amp-d5	1	141,1 -> 93,4	MRM	ISTD	20,0	
Cocaine	1	304,1 -> 182,0	MRM	Целевое соед.	20,0	
Cocaine-d3	1	307,1 -> 185,0	MRM	ISTD	20,0	
MDMA	1	194,2 -> 163,3	MRM	Целевое соед.	20,0	
MDMA-d5	1	199,2 -> 164,3	MRM	ISTD	20,0	
Meth	1	150,1 -> 119,3	MRM	Целевое соед.	20,0	
Meth-d5	1	155,2 -> 92,3	MRM	ISTD	20,0	

- 6 В столбце **Задачи метода** нажмите **Сохранить/Выйти > Выход**, затем выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии** после применения метода и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 3. Обнаружение выбросов

- 7 Нажмите клавишу F5, чтобы выполнить анализ серии. Теперь в столбце **Точность** для амфетамина появились красные (высокие) и синии (низкие) значения выброса

Окно **Таблица серии** можно разделить на две части. По умолчанию положение столбцов **Проба** зафиксировано, и прокручивать можно только остальные столбцы. Разделив таблицу на две части, можно определить, какие столбцы отображаются в каждой из них. Нужно снять флажок в пункте **Блокировать столбцы пробы** контекстного меню таблицы серии, чтобы можно было разделить окно **Таблица серии**.

		Метод Amp				Результаты Amp				Результаты к...		Результат...		Результаты к...					
№	Название	Файл	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.	Алг. шума	ВУ	Откл.	РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метрика инт.	Отношение	РИ	ВУ	Откл.	Отношение	РИ
	Blank-1	CMAMB	L1	12.05.2006 13:48		RMS													
	Calib-L1	CMAMC	L1	12.05.2006 13:51	2,5000	RMS	2,141	658		2,4161	2,4161	96,6	Accepted	24,3		2,129	1397	25,9	
	Calib-L2	CMAMC	L2	12.05.2006 13:54	5,0000	RMS	2,140	1059		4,8556	4,8556	97,1	Accepted	33,5		2,128	1298	25,9	
	Calib-L3	CMAMC	L3	12.05.2006 13:57	12,5000	RMS	2,134	2673		12,8162	12,8162	102,5	Accepted	26,7		2,121	1377	26,3	
	Calib-L4	CMAMC	L4	12.05.2006 14:00	25,0000	RMS	2,022	4952		25,9394	25,9394	103,8	Accepted	29,1		1,990	1304	28,8	
	Calib-L5	CMAMC	L5	12.05.2006 14:03	125,0000	RMS	2,101	18605		124,0262	124,0262	99,2	Accepted	27,0		2,076	1053	26,4	
	QC-L2	CMAMC	L2	12.05.2006 14:06	5,0000	RMS	2,142	1006		4,3336	4,333	86,7	Accepted	27,7		2,131	1356	31,1	
	QC-L4	CMAMC	L4	12.05.2006 14:09	25,0000	RMS	2,135	4716		26,9911	26,991	108,0	Accepted	25,6		2,121	1196	31,1	
	Sample-1	CMAMS		12.05.2006 14:12		RMS	2,080	6					Rejected						
	Sample-2	CMAMS		12.05.2006 14:15		RMS	2,143	1004		4,0008	4,0008		Accepted	30,9		2,130	1445	25,7	
	Sample-3	CMAMS		12.05.2006 14:18		RMS	2,105	2590		13,3556	13,3556		Accepted	25,3		2,089	1284	29,8	



**Шаг 3** С помощью следующего набора значков для флагов выбросов



- 1 На панели инструментов щелкните значок **Показать строки с высокими выбросами** , чтобы отобразить только пробы с высокими выбросами.
- 2 Щелкните значок **Выключить фильтр выбросов** , чтобы отобразить все пробы.
- 3 На панели инструментов щелкните значок **Показать строки с высокими/низкими выбросами** , чтобы отобразить только пробы с высокими или низкими выбросами.
- 4 Щелкните значок **Показать строки с высокими/низкими выбросами**  еще раз, чтобы отобразить все пробы.

## 5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

### Задание 3. Обнаружение выбросов

- 5 Щелкните значок **Выбор выбросов** , чтобы открыть диалоговое окно **Выбросы**.
- 6 Снимите флажки **Точность** и **Время удерживания** и нажмите кнопку **ОК**.
- 7 Щелкните значок **Выбор выбросов** , чтобы открыть диалоговое окно **Выбросы**.
- 8 Установите флажки **Точность** и **Время удерживания** и нажмите кнопку **ОК**.
  - Обратите внимание на то, что для восстановления в окне **Таблица серии** просмотра всех файлов данных, с выбросами и без выбросов, нужно просто щелкнуть еще раз значок, выбранный для фильтрации выбросов.

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

## Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

С помощью этого упражнения вы научитесь:

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

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

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

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

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

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

## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

**Шаг 1** Откройте файл серии *iii\_Test\_01.batch.bin*.

- 1 Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок **Количественный анализ (QQQ)** на рабочем столе.
- 2 На вкладке **Главная** щелкните **Открыть серию** для отображения диалогового окна **Открыть серию**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\DrugsOfAbuse** и щелкните файл **iii\_Test\_01.batch.bin**.

Если серия уже открыта, пропустите это шаг и перейдите к шагу 2.

Эту программу также можно запустить, щелкнув **Программы > Agilent MassHunter Quantitative > Quantitative Analysis (QQQ)** в меню Пуск.

При отсутствии макета по умолчанию щелкните на вкладке **Вид Восстановить макет по умолчанию** перед открытием серии.

**Шаг 2** Выполните количественный анализ пробы этой серии и сохраните результаты.

- 1 Открыв таблицу серии, на вкладке **Главная** щелкните **Анализировать серию** для формирования результатов.
- 2 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.

Если количественный анализ серии уже выполнен, пропустите этот шаг и переходите к **«Создайте метод отчета в формате PDF.»**.

**Шаг 3** Создайте метод отчета в формате PDF.

- 1 На вкладке **Главная** щелкните **Создать отчет**.  
Откроется диалоговое окно **Формирование отчета**.
- 2 Примите используемую по умолчанию **Папку отчета** для этого отчета.
- 3 Нажмите кнопку **Создать** в поле **Метод отчета**, чтобы создать новый метод отчета.
- 4 Нажмите кнопку **Добавить шаблон** в диалоговом окне **Правка метода отчета**, чтобы открыть браузер.

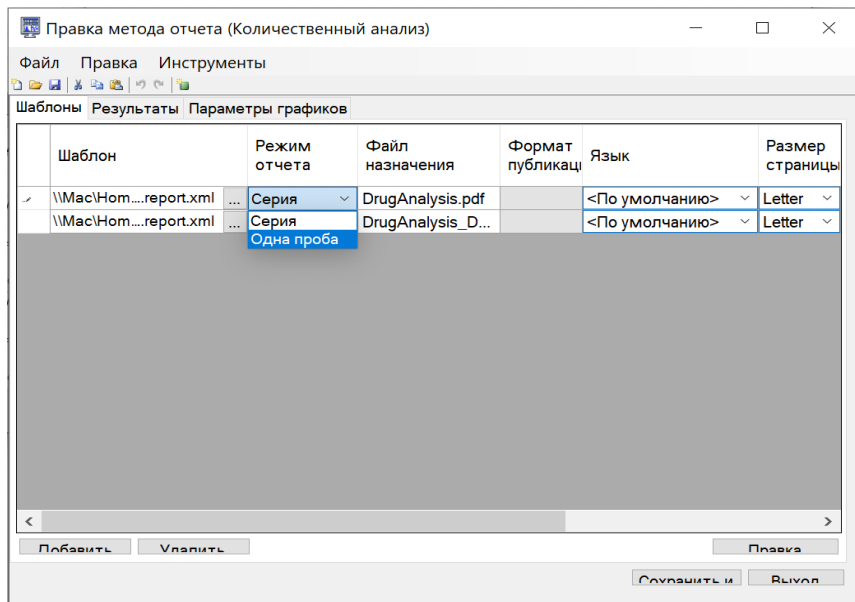
## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

- 5 Перейдите в каталог **MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting**, выберите **DrugAnalysis.report.xml** и нажмите кнопку **Открыть**. Программа добавит шаблон в поле **Шаблон** на панели **Правка метода отчета**.
- 6 Повторите **шаг 4** и **шаг 5**, чтобы добавить шаблон `DrugAnalysis_DopingScreening.report.xml`.
  - В поле **Папка отчета** можно изменить каталог назначения для сохранения отчета.
  - Программная функция правки метода отчета позволяет объединять существующие шаблоны в метод отчета для разработки отчета в формате Excel или PDF либо в обоих форматах.
  - По умолчанию система использует последний метод отчета, с помощью которого был сформирован последний отчет. Вместо того чтобы формировать новый метод отчета, можно использовать метод по умолчанию, если он подходит, либо выбрать другой существующий метод.
  - Чтобы выбрать существующий метод отчета, нажмите кнопку **Выбрать** в поле **Метод отчета** и перейдите в папку, чтобы выбрать метод.

## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

**Шаг 4** Отредактируйте метод отчета, чтобы создать PDF-отчеты по одной пробе или серии.

- 1 В диалоговом окне **Правка метода** отчета выберите пункт **Одна проба** в раскрывающемся меню поля **Режим отчета** для строки шаблона **DrugAnalysis.report**.



- 2 Выберите пункт **Серия** в раскрывающемся меню поля **Режим отчета** для строки шаблона **DrugAnalysis\_Doping Screening.report**.
- 3 Выберите язык в раскрывающемся меню поля **Язык**.
- 4 Выберите размер бумаги в раскрывающемся меню поля **Размер бумаги**.

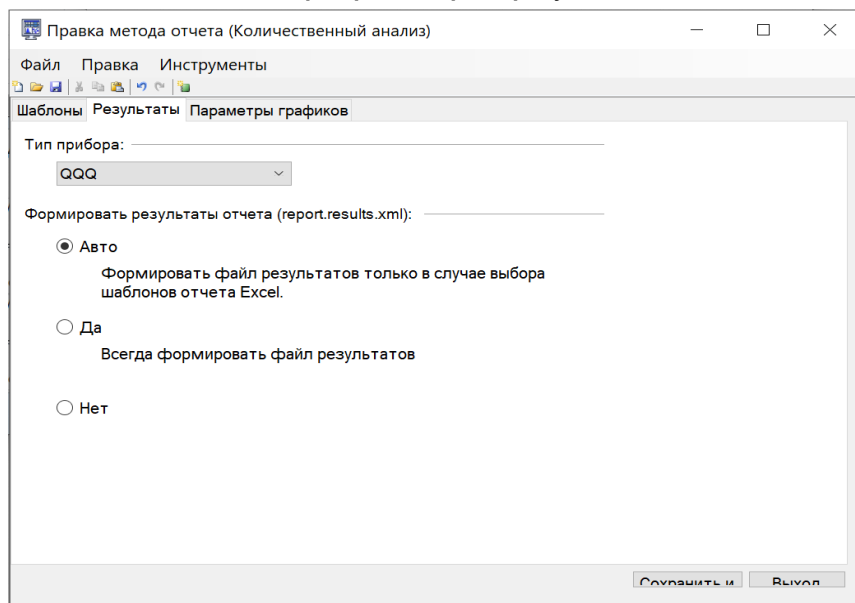
- В диалоговом окне **Правка метода отчета** можно редактировать определенные функции шаблонов, выбираемых для включения в метод отчета.
- Функция составления отчетов в формате PDF позволяет создавать отчеты на английском, китайском или японском языке. Отчеты в формате Excel предоставляются только на английском языке, поэтому данный параметр будет затенен.
- В отчетах Excel имеются ограничения на размер бумаги. В отчетах PDF предусмотрен выбор вариантов.

## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

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

**Шаг 5** Выберите способ обработки результатов отчета системой.

- 1 Выберите вкладку **Результаты** в окне **Правка метода отчета**.
- 2 Нажмите **Авто** в поле **Формировать файл результатов отчета**.



- 3 Выберите пункт **QQQ** в раскрывающемся меню поля Прибор.

В большинстве случаев рекомендуется использовать вариант **Авто**. 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.

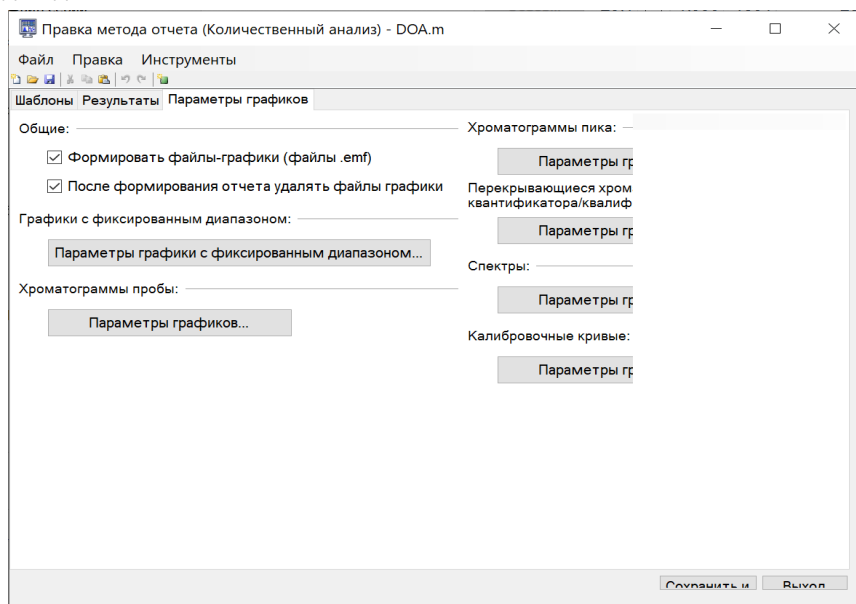
**Шаг 6** Задайте параметры графиков для метода.

- 1 Откройте вкладку **Параметры графиков**, чтобы посмотреть параметры графиков.
- 2 Установите флажок **Формировать файлы графиков**, чтобы добавить графики в отчет.

## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

- 3 Для остальных параметров графиков оставьте значения по умолчанию.

Вкладка **Параметры графиков** позволяет задавать внешний вид графиков в отчете путем редактирования в разделах **Наложение хроматограмм квантификатора/квалификатора**, **Спектры**, **Хроматограмма пробы**, **Калибровочные кривые** и **Параметры графиков с фиксированным диапазоном**. Если не изменить эти параметры, программа применит стандартные значения, подходящие для данных.



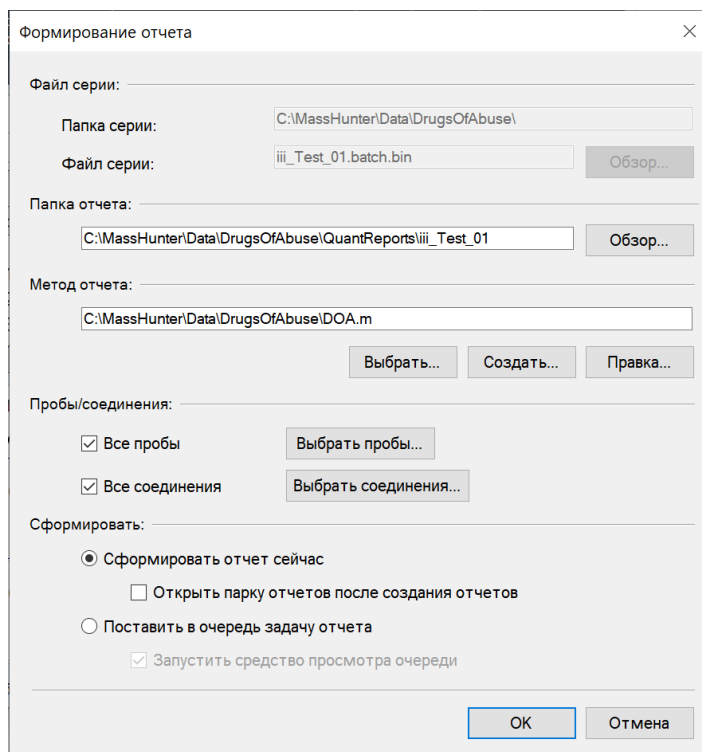
**Шаг 7** Сохраните метод отчета.

- 1 Щелкните значок сохранения в окне **Правка метода отчета**.
- 2 Присвойте методу отчета имя **DOA.m**.

Прежде чем можно будет закрыть окно и сформировать отчет, необходимо сохранить метод.

**Шаг 8** Закройте окно **Правка метода отчета**.

- 1 Выберите **Сохранить/Выйти**, чтобы закрыть диалоговое окно **Правка метода отчета** и вернуться в окно **Формирование отчета**.





**Шаг 9** Сформируйте отчет с помощью метода

- 1 Убедитесь в том, что только что созданный метод указан в поле **Метод отчета**.
- 2 В поле **Пробы/Соединения** снимите флажок **Все пробы**, чтобы открыть таблицу серии.
- 3 Выберите одну из проб в окне таблицы серии и нажмите кнопку **ОК**.
- 4 Установите флажок **Все соединения**, чтобы отображать все соединения в выбранной пробе.
- 5 Выберите переключатель **Сформировать отчеты сейчас** и нажмите кнопку **ОК**, чтобы сформировать отчет.

## 6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

- В отчете можно показывать все пробы и все соединения серии либо определенные пробы или соединения, выбранные в таблице серии.
- Отчеты в формате PDF формируются быстро, поэтому выбор **Сформировать отчеты сейчас** — это лучший вариант для немедленного получения отчета. Если наряду с отчетом формируется файл Excel, то можно выбрать элемент **Поставить в очередь задачу отчета**, чтобы наблюдать за процессом формирования отчета.
- Все формируемые отчеты отображаются в средстве просмотра. Самый последний отчет отображается вверху списка.
- Просмотр и печать отчетов осуществляются из созданного файла Excel или PDF.

<input type="checkbox"/> Имя	Дата изменения	Тип	Размер
 DrugAnalysis.pdf	01.12.2021 23:02	Adobe Acr...	532 КБ
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	01.12.2021 23:02	Adobe Acr...	876 КБ

### Шаг 10 Просмотрите отчет.

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

# Справка

Десять главных возможностей	90
Методы количественного анализа	95
Непараметрический интегратор	96
Краткий обзор серии: Результаты	98
Краткий обзор соединений	99
Подтверждение соединения	101
Калибровка соединения	103

## Десять главных возможностей

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

### Краткий обзор серии: Отладка таблицы серии

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

Уровень детализации применения количественного анализа позволяет быстро манипулировать конкретным сигналом.

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

### Редактор метода

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

### Калибровка

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

### Интегратор

- Интеграторы Agile и Agile2 — предоставление на всех уровнях сигналов непараметрического интегратора, который снижает потребность в интегрировании вручную.

- Метрики интегратора — формирование метрик, которые характеризуют интегрирование сигналов, для принятия, проверки или отклонения интегрирования.
- Соотношение сигнал-шум — расчет соотношения сигнал-шум для пиков.
- Графики — обеспечение превосходной взаимосвязи между графическим отображением соединений и отображением сведений о пиках.

#### **Краткий обзор серии: Результаты**

- Навигация — перемещение (к предыдущему или следующему элементу либо непосредственно к элементу) между пробами, соединениями, временными сегментами и группами соединений.
- Представления соединений — переключение между подробными сведениями о текущем соединении/пробе и сводными данными нескольких соединений/проб.
- Представления таблицы серии — возможность использования макетов простых таблиц либо вертикально или горизонтально вложенных таблиц, содержащих подробные данные и макет таблицы соединения.
- Макет окна — преобразование экрана в соответствии со значениями по умолчанию либо сохранение или загрузка пользовательских макетов окна.
- Автообзор — автоматическое и интерактивное отображение каждой пробы с возможностью остановки в любое время для более тщательного изучения.
- Столбцы — добавление, удаление, переупорядочение, сохранение, загрузка, восстановление или сброс столбцов.
- Плавающая панель — перемещение любой панели на другой монитор для создания двухмониторных представлений.
- Экспорт таблицы — экспорт краткой обзорной таблицы серии непосредственно в файлы Excel.
- Экспорт графиков — экспорт любого графика в множество форматов с изменяемым размером.
- Копировать/Вставить — копирование или вставка любого графика непосредственно в приложения Microsoft Office, например, в Word, PowerPoint, Excel и т. д.

## 7 Справка

### Десять главных возможностей

- Печать/Предварительный просмотр — печать или предварительный просмотр содержимого экрана в формате WYSIWYG (что видишь, то и получишь).
- Фильтр — отображение любого сочетания типов пробы.
- Сортировка — сортировка любого столбца, отображаемого в таблице.

### Краткий обзор соединений: Результаты

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

### Обнаружение выбросов

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

## 7 Справка

### Десять главных возможностей

#### Отчет

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

#### Обновить

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

#### Качественный

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

# Методы количественного анализа

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

Agilent MassHunter Quantitative Analysis (для QQQ) - Метод - <C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantResults\jil\_Test\_01\_batch.bin>

Восстановить макет по умолчанию | Загрузить / Сохранить макет | Добавить/удалить столбцы | Загрузить параметры столбцов | Автопросмотр проб |  
 Предоставленные макеты | Панели инструментов | Восстановить столбцы по умолчанию | Сохранить параметры столбцов | Автопросмотр соединений |  
 Увеличить панель | Макет таблицы серии | Сброс сортировки | Блокировать столбцы пробы/соединения | Сброс вида таблицы | Автопросмотр

Задачи метода | Таблица метода | Проба

Создать/открыть метод | Временной сегмент: < все > | Соединение: < Апр > | Сброс вида таблицы

Проба	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
Сайлb-L5	СМАМСa1_L5.d	Кал.	L5	APC autotune.m	12.05.2006 14:03	

Квантификатор	Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Материнский ион	Дочерний ион	ВУ	Поллярность ионов	Энергия соудар
Апр	Апр-d5	1	136.2 -> 91.4	MRM	Целевое соед.	136.2	91.4	2.102	Positive	
	Cocaine	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	2.078	Positive	
	Cocaine-d3	1	304.1 -> 182.0	MRM	Целевое соед.	304.1	182.0	2.449	Positive	
	MDMA	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	2.450	Positive	
	MDMA-d5	1	194.2 -> 163.3	MRM	Целевое соед.	194.2	163.3	2.269	Positive	
	Meth	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	199.2	164.3	2.269	Positive	
		1	150.1 -> 119.3	MRM	Целевое соед.	150.1	119.3	2.239	Positive	

Сведения о пробе

Сведения о соединении

4 соединения (серио 4) | 4 ISTD (серио 4) | DESKTOP-F7ATGCI\Джакм

Рис. 12. Количественное представление – Редактор метода

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

# Непараметрический интегратор

## Что такое непараметрический интегратор?

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

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

## Пример результатов интегрирования

На **Рис. 13** показаны данные с двумя экстремумами.

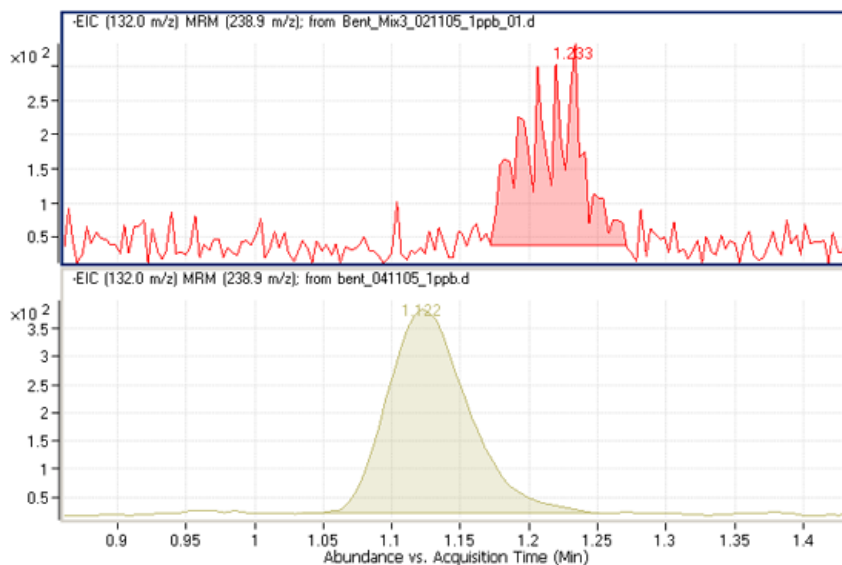


Рис. 13. Непараметрический интегратор — данные с двумя экстремумами

## 7 Справка

### Непараметрический интегратор

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

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

# Краткий обзор серии: Результаты

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

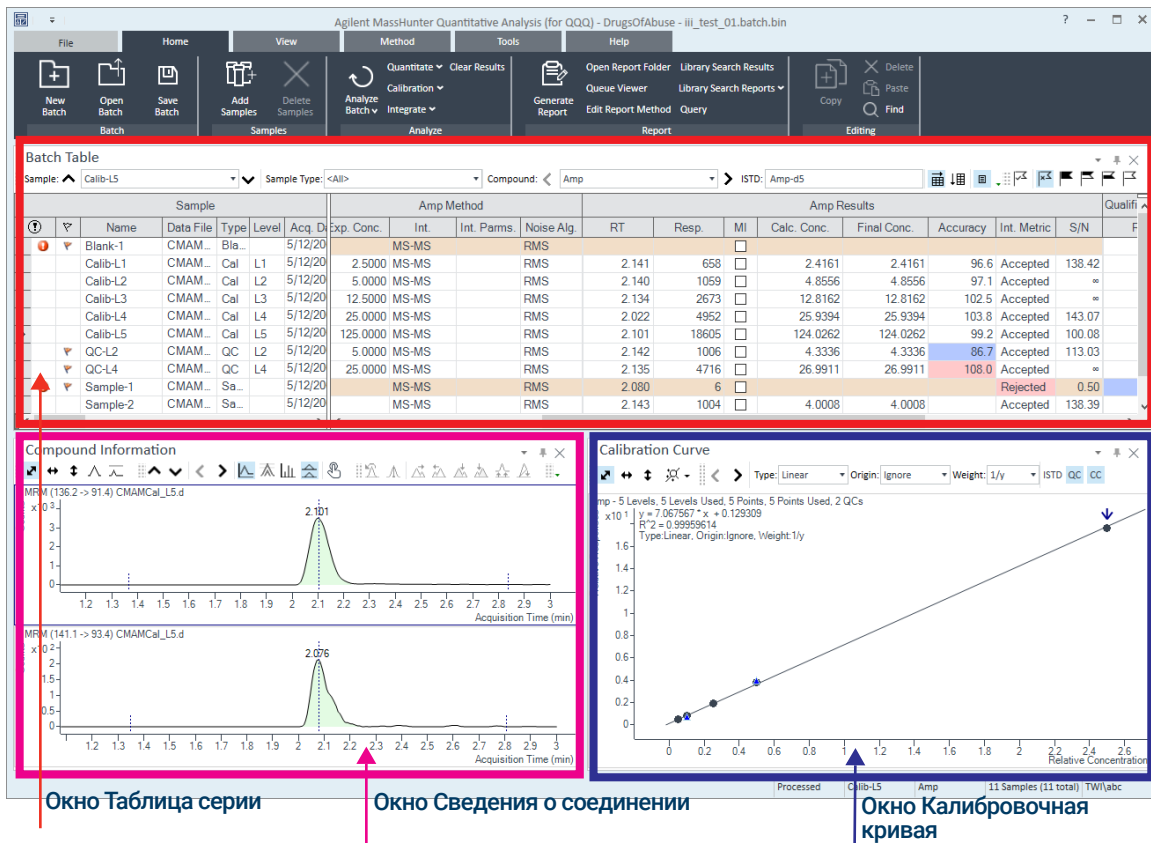


Рис. 14. Результаты по амфетамину

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

## Краткий обзор соединений

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

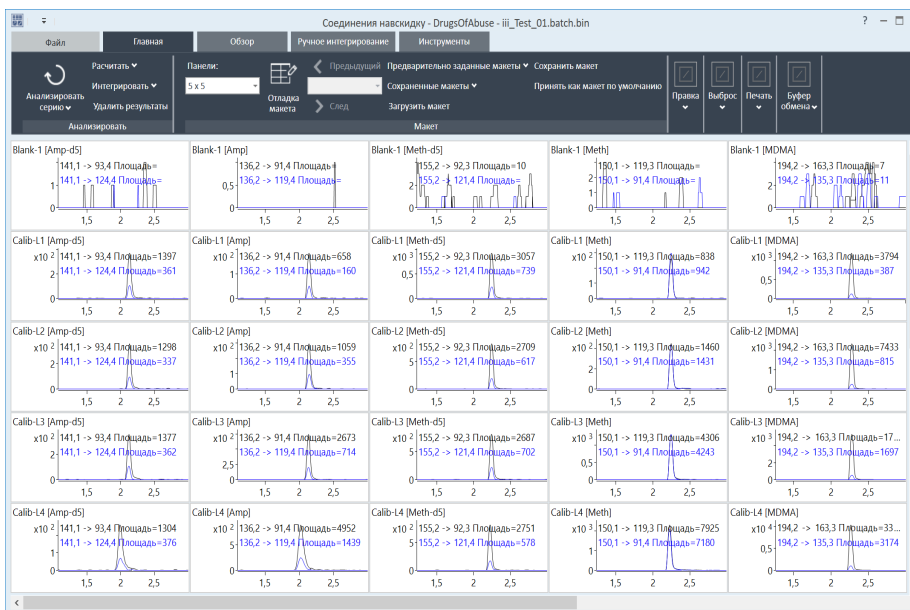


Рис. 15. Краткий обзор функции Соединения навскидку в программе Quantitative Analysis

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

- На вкладке **Пробы** перечислены все пробы, включенные в серию, и представлены средства выбора всех проб или определенных проб.
- На вкладке «Соединения» перечислены соединения, обнаруженные в серии. Она позволяет выбирать соединения для просмотра.

## 7 Справка

### Краткий обзор соединений

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

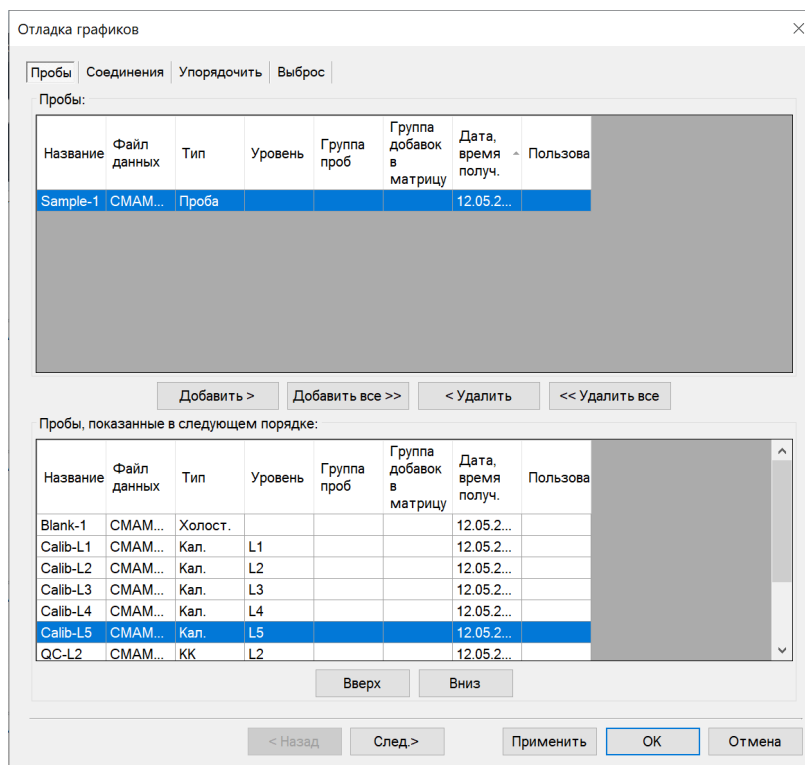


Рис. 16. Варианты отладки для Соединений навскидку

## Подтверждение соединения

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

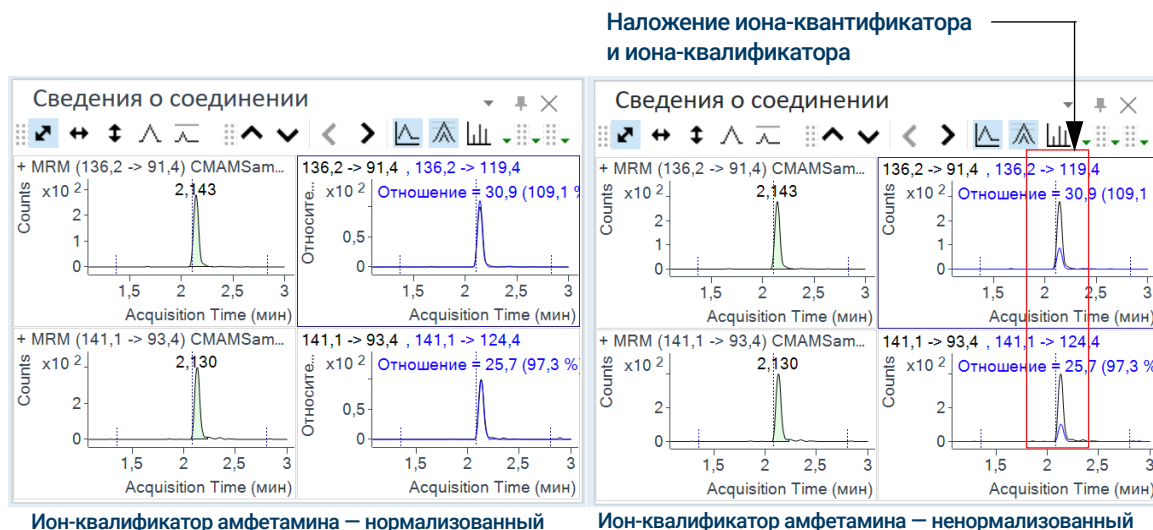


Рис. 17. Амфетамин в программе Quantitative Analysis

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

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

## 7 Справка

### Подтверждение соединения

На рисунке слева трудно определить, находится ли ион-квалификатор в пределах допустимого отклонения, так как размер пика квалификатора нормализован с коэффициентом  $1/0,265$ . На рисунке справа центр диапазона с допустимыми отклонениями находится в точке, где площадь составляет 26,5 % от площади пика иона-квантификатора, и ион-квалификатор изображен ненормализованным, т. е. в том же масштабе, что и квантификатор. Если ион выходит за пределы диапазона с допустимыми отклонениями, то он затушевывается синим цветом, но остается достаточно прозрачным, чтобы не заслонять ион-квантификатор. Так проще визуальнo убедиться в присутствии соединений.

## Калибровка соединения

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

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

### Помощник аппроксимации кривой

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

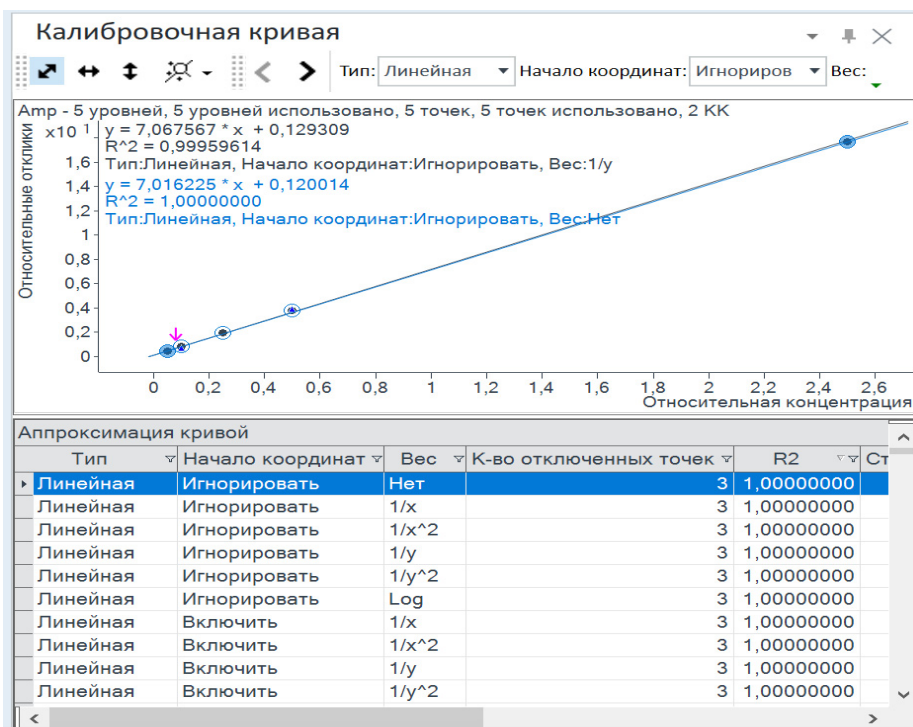


Рис. 18. Помощник аппроксимации кривой

## 7 Справка

### Калибровка соединения

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

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

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

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

Сведения о точках данных

## 7 Справка Калибровка соединения

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

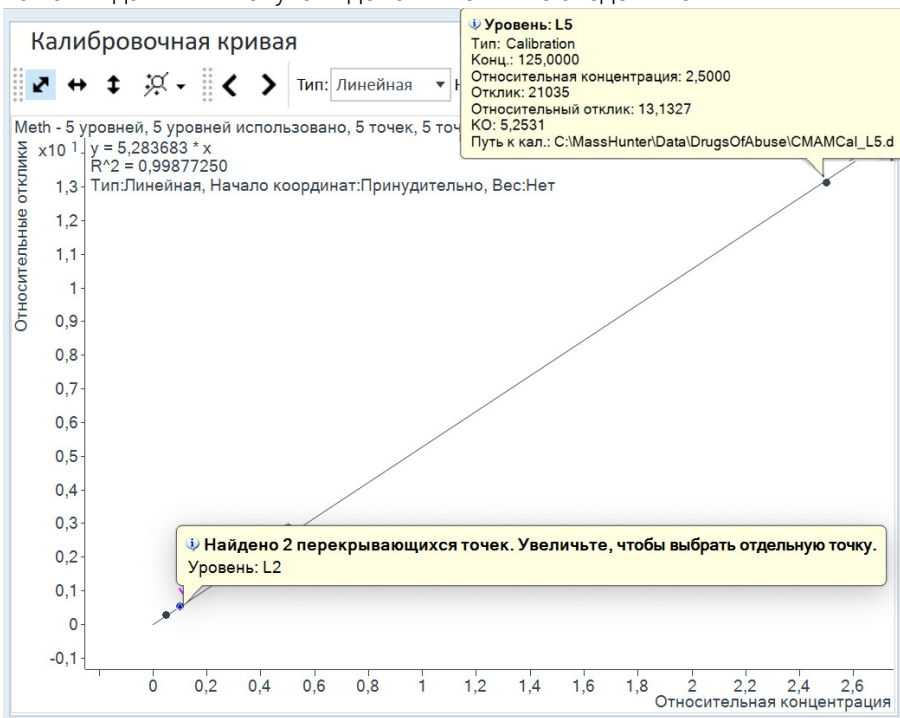


Рис. 19. Результаты по амфетамину: сведения о точках данных калибровки

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

### Масштабирование точек данных

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

7 **Справка**  
Калибровка соединения



[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

© Agilent Technologies, Inc. 2021

Издание 1-е, ноябрь 2021 г.



G3336-98057

