



Программное обеспечение Agilent MassHunter
Workstation

Количественный анализ

**Ознакомительное руководство Quant
Classic**

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

G3336-98058

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 **16**

Задание 5. Установка интегратора **22**

Задание 6. Анализ и сохранение метода **24**

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

Задание 1. Отладка новой серии **27**

Задание 2. Отладка нового метода для серии **30**

Задание 3. Отладка целевых соединений **34**

Задание 4. Отладка количественного анализа **35**

Задание 5. Анализ и сохранение метода **37**

Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии **40**

Задание 2. Изменение макетов окна результатов **44**

Задание 3. Экспорт и печать результатов **50**

Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой **54**

Задание 2. Непараметрическое интегрирование **57**

Задание 3. Обнаружение выбросов **71**

Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

Справка

Десять главных возможностей **84**

Методы количественного анализа **89**

Непараметрический интегратор **90**

Краткий обзор серии: Результаты **92**

Краткий обзор соединений **93**

Подтверждение соединения **95**

Калибровка соединения **97**

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 данном *Ознакомительном руководстве* рассматривается **Классический** пользовательский интерфейс.

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 16
- Задание 5. Установка интегратора 22
- Задание 6. Анализ и сохранение метода 24

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: амфетамина, кокаина, метамфетамина 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**.

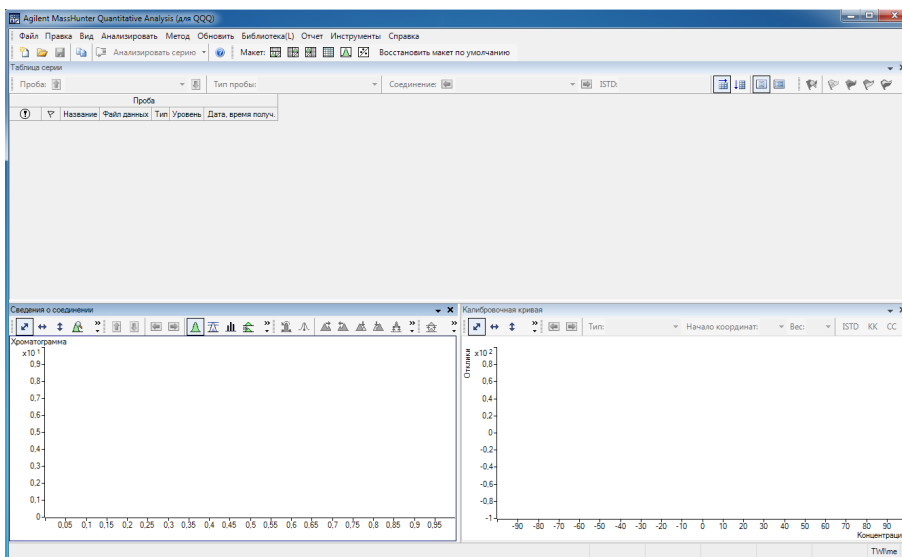


Рис. 1. Макет по умолчанию

Эту программу также можно запустить, выбрав **Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ)** в меню **Пуск**.

При работе с данными QQQ доступны другие функции.

Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем создавать новую серию.

Восстановить макет по умолчанию

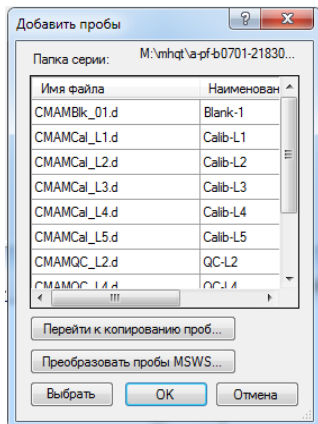
- 2 Выберите **Файл > Новая серия**. Откроется диалоговое окно **Новая серия**.

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

Задание 1. Отладка новой серии

- 3 Перейдите в папку `\Ваш каталог\DrugsOfAbuse\`.
- 4 Введите имя файла серии `iii_Test_01` и нажмите кнопку **Создать**.
- 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.

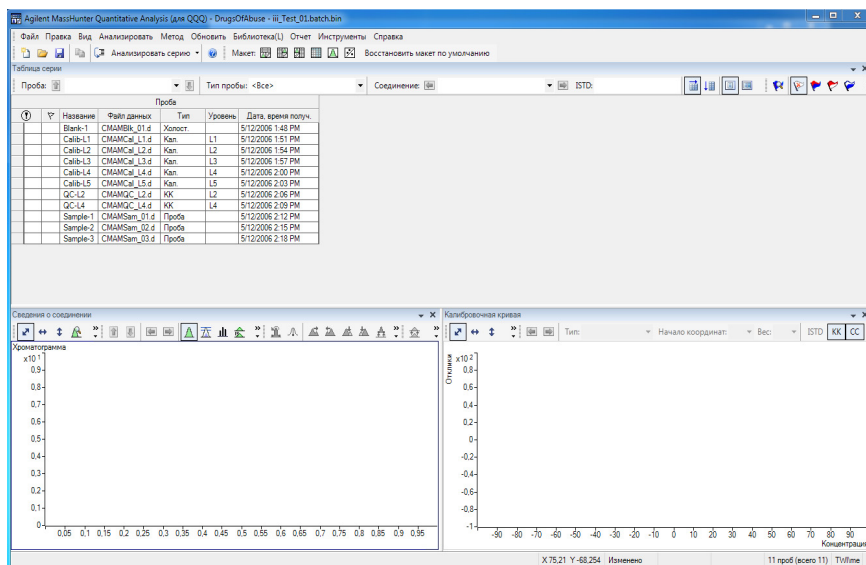


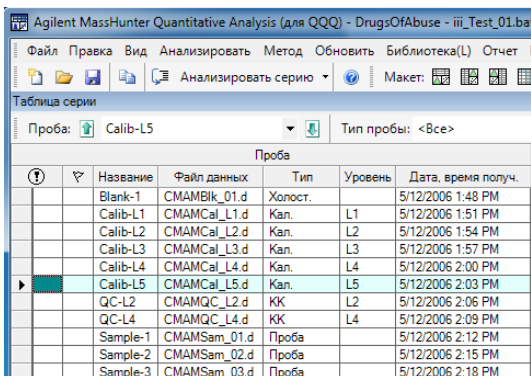
Рис. 2. Таблица серии, содержащая пробы наркотических препаратов (до выполнения количественного анализа)

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.



Agilent MassHunter Quantitative Analysis (для QQQ) - DrugsOfAbuse - iii_Test_01.bat

Файл Правка Вид Анализировать Метод Обновить Библиотека(L) Отчет I

Анализировать серию Макет: [Grid] [Table] [List] [Table]

Таблица серии

Проба: Calib-L5 Тип пробы: <Все>

Проба						
?	▼	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.
		Blank-1	SMAMBlk_01.d	Холост.		5/12/2006 1:48 PM
		Calib-L1	SMAMCal_L1.d	Кал.	L1	5/12/2006 1:51 PM
		Calib-L2	SMAMCal_L2.d	Кал.	L2	5/12/2006 1:54 PM
		Calib-L3	SMAMCal_L3.d	Кал.	L3	5/12/2006 1:57 PM
		Calib-L4	SMAMCal_L4.d	Кал.	L4	5/12/2006 2:00 PM
		Calib-L5	SMAMCal_L5.d	Кал.	L5	5/12/2006 2:03 PM
		QC-L2	SMAMQC_L2.d	КК	L2	5/12/2006 2:06 PM
		QC-L4	SMAMQC_L4.d	КК	L4	5/12/2006 2:09 PM
		Sample-1	SMAMSam_01.d	Проба		5/12/2006 2:12 PM
		Sample-2	SMAMSam_02.d	Проба		5/12/2006 2:15 PM
		Sample-3	SMAMSam_03.d	Проба		5/12/2006 2:18 PM

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

Задание 2. Отладка нового метода для серии

- 2 Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить 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.

Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем создавать новый метод.

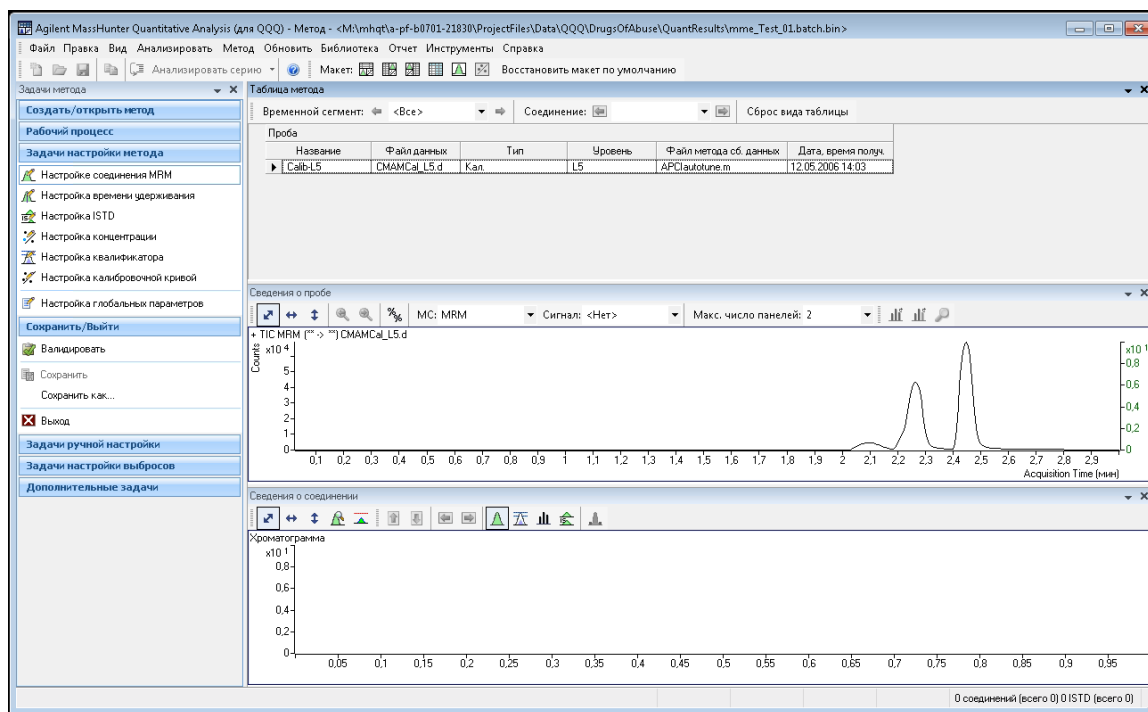


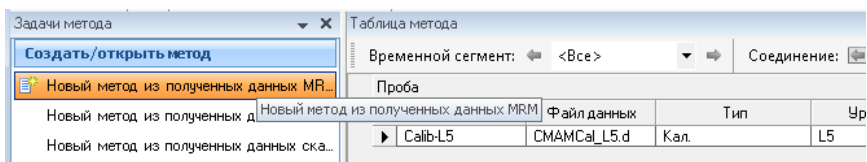
Рис. 3. Режим редактирования метода

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

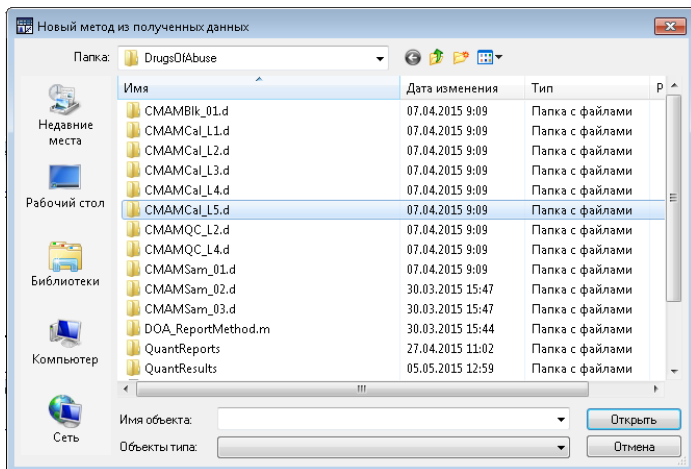
Задание 2. Отладка нового метода для серии

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

Можно также выбрать **Метод > 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 **CMAMCa_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.

Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время полук.			
Квантификатор								
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	Ионпредшественник	Ион-продукт	ВУ	Поларность ионов
Amr	1	136.2 -> 91.4	MRM	Целевое вещество	136.2	91.4	2,102	Positive
Amr-б5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	2,078	Positive
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Целевое вещество	304.1	182.0	2,449	Positive
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	2,450	Positive
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Целевое вещество	194.2	163.3	2,269	Positive
MDMA-д5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	199.2	164.3	2,269	Positive
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Целевое вещество	150.1	119.3	2,239	Positive
Meth-б5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	155.2	92.3	2,233	Positive

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

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

Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время полук.			
Квантификатор								
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Amr	1	136.2 -> 91.4	MRM	Целевое вещество	2,102	1,000	1,000	Minutes
Amr-б5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	2,078	1,000	1,000	Minutes
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Целевое вещество	2,449	1,000	1,000	Minutes
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	2,450	1,000	1,000	Minutes
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Целевое вещество	2,269	1,000	1,000	Minutes
MDMA-д5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	2,269	1,000	1,000	Minutes
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Целевое вещество	2,239	1,000	1,000	Minutes
Meth-б5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	2,233	1,000	1,000	Minutes

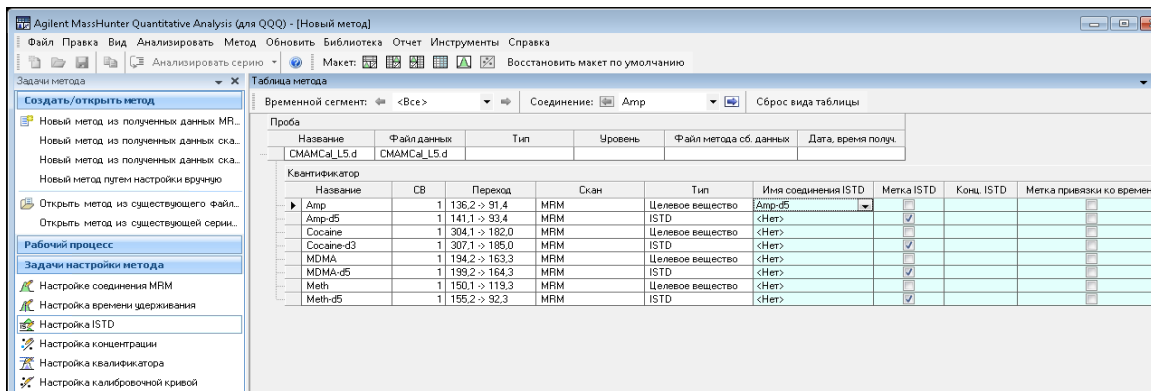
2 Упражнение 1: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных MRM

Задание 3. Отладка целевых соединений

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

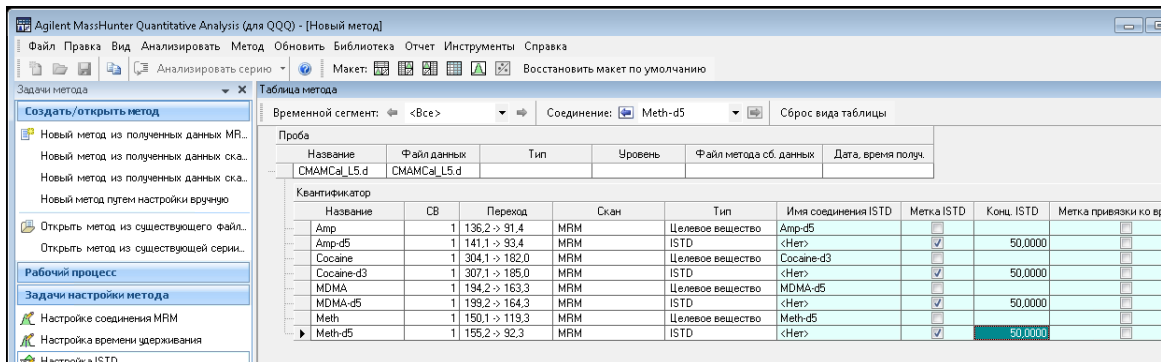
a Выберите **Задачи отладки метода > Отладка ISTD**.

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.



c Щелкните название внутреннего стандарта, связанное с целевым соединением.

d Введите концентрацию внутреннего стандарта (**Конц. ISTD**) для каждого соединения-внутреннего стандарта (в данном примере 50,000).



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 В главном меню выберите **Метод > 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

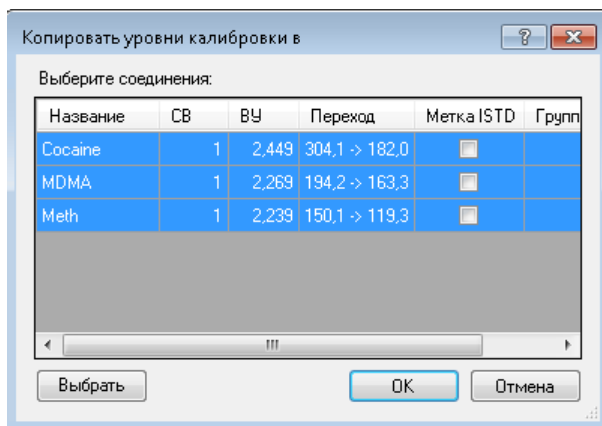
The screenshot shows the 'Method Table' window in a software application. The window title is 'Таблица метода' and it contains three calibration tables for different quantifiers. The first table is for 'СМММС_д L5.д', the second for 'СМММС_ж L5.д', and the third for 'СМММС_ж L5.д'. Each table has columns for 'Уровень' (Level), 'Конц.' (Concentration), 'Откл.' (Offset), 'Включить' (Include), 'Тип' (Type), 'Путь к кал.' (Path to cal.), 'Дата, время получения калибровочного STD' (Date, time of acquisition of calibration STD), 'Время последнего обновления цены' (Last price update time), and 'Отст.' (Offset). The 'Конц.' column is being edited for each level.

Уровень	Конц.	Откл.	Включить	Тип	Путь к кал.	Дата, время получения калибровочного STD	Время последнего обновления цены	Отст.
L1	1,0000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка		05.05.2015 13:21		
L2	2,0000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка		05.05.2015 13:21		
L3	3,0000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка		05.05.2015 13:17		
L4	4,0000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка		05.05.2015 13:17		
L5	5,0000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка		05.05.2015 13:17		

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

Задание 4. Отладка количественного анализа

- 3 Выберите **Метод > 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

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

Проба

Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода об. данных	Дата, время получ.
СМАНСА_L5.d	СМАНСА_L5.d				

Квантитатор

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Амф	1	136.2 > 91.4	MRM	Целевое вещество	2,102	1,000	1,000	Minutes

Калибровка

Уровень	Конц.	Отклик	Включить	Тип	Путь к кал.	Дата, время получения калибровочного STD	Время последнего обновления уровня	отн. станд. отн.
L1	2,50000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:24	
L2	5,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:23	
L3	12,50000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:24	
L4	25,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:24	
L5	25,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:23	

Квантитатор

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Амф-Б	1	141.1 > 93.4	MRM	Целевое вещество	2,443	1,000	1,000	Minutes

Калибровка

Уровень	Конц.	Отклик	Включить	Тип	Путь к кал.	Дата, время получения калибровочного STD	Время последнего обновления уровня	отн. станд. отн.
L1	50,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:17	
L2	50,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:17	
L3	50,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:17	
L4	50,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:17	
L5	50,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:17	

Квантитатор

Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Кокаин	1	304.1 > 182.0	MRM	Целевое вещество	2,443	1,000	1,000	Minutes

Калибровка

Уровень	Конц.	Отклик	Включить	Тип	Путь к кал.	Дата, время получения калибровочного STD	Время последнего обновления уровня	отн. станд. отн.
L1	2,50000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:25	
L2	5,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:25	
L3	12,50000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:25	
L4	25,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:25	
L5	25,00000		<input checked="" type="checkbox"/>	Калибровка			05.05.2015 13:25	

Скопировано в кокаин, MDMA и метамфетамин.

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.

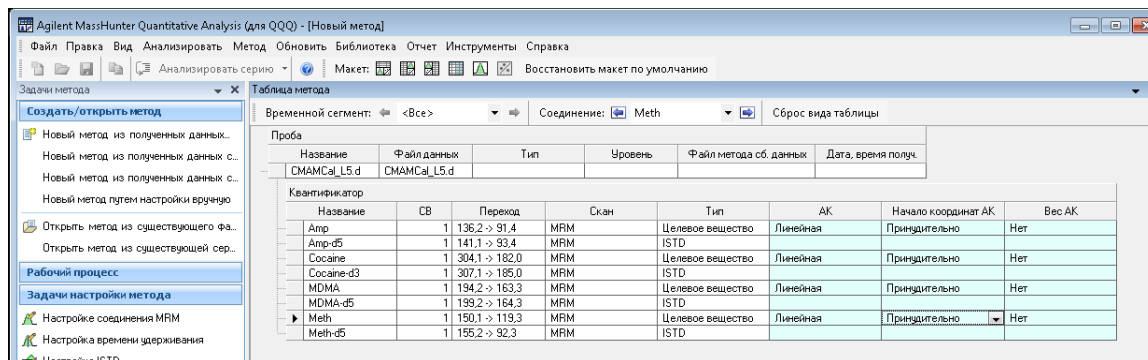
Имя	SV	Переход	Скан	Тип	Ион-радикальный	Ион-продукт	Неопределенность
Alpr	1	136.2 > 91.4	MRM	Целевое вещество	136.2	91.4	Относительный
Калификатор							
Ион-радикальный		136.2	119.4	136.2 > 119.4	28.3	20.0	
Ион-продукт		136.2	119.4	136.2 > 119.4	28.3	20.0	
Alpr-β	1	141.1 > 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	Относительный
Калификатор							
Ион-радикальный		141.1	124.4	141.1 > 124.4	26.4	20.0	
Ион-продукт		141.1	124.4	141.1 > 124.4	26.4	20.0	
Cocaine-β	1	307.1 > 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	Относительный
Калификатор							
Ион-радикальный		307.1	85.0	307.1 > 85.0	3.7	20.0	
Ион-продукт		307.1	85.0	307.1 > 85.0	3.7	20.0	
MDMA	1	194.2 > 163.3	MRM	Целевое вещество	194.2	163.3	Относительный
Калификатор							
Ион-радикальный		194.2	135.3	194.2 > 135.3	9.6	20.0	
Ион-продукт		194.2	135.3	194.2 > 135.3	9.6	20.0	

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

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

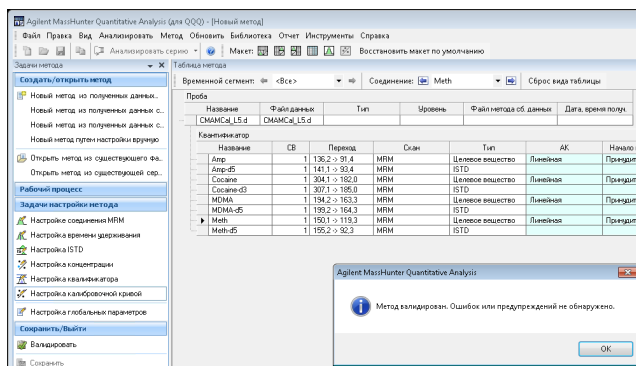
Задание 4. Отладка количественного анализа

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



Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.		
Проба							
СМАМСa_L5.d	СМАМСa_L5.d						
Квантификатор							
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	АК	Начало координат АК	Вес АК
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Целевое вещество	Линейная	Принудительно	Нет
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Целевое вещество	Линейная	Принудительно	Нет
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD			
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Целевое вещество	Линейная	Принудительно	Нет
MDMA-d5	1	193.2 -> 164.3	MRM	ISTD			
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Целевое вещество	Линейная	Принудительно	Нет
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD			

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



Сохранить/Выйти

Валидировать

Сохранить

Сообщение: Метод валидирован. Ошибок или предупреждений не обнаружено.

OK

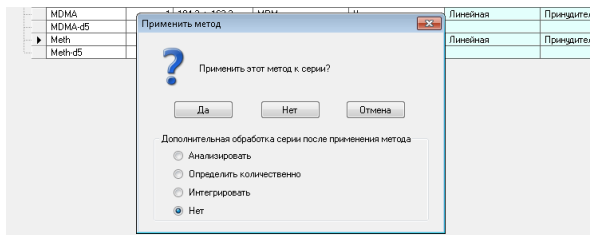
- 11 Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **OK**.

- 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.

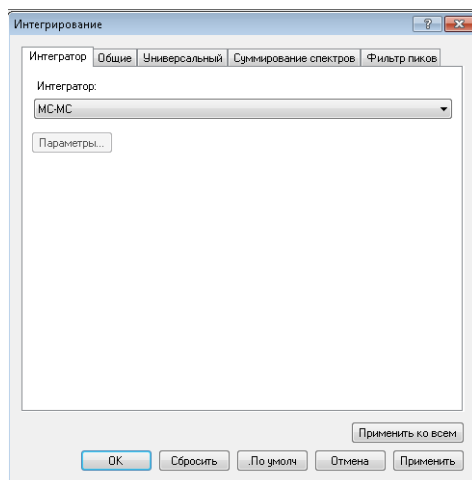
- 1 Выберите **Метод > Правка** или нажмите клавишу **F10**.
- 2 Выберите **Метод > Дополнительные задачи > Отладка параметров интегрирования**.
- 3 В окне **Таблица метода** щелкните в поле, расположенном в правой части значения **Инт.**

Проба							
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.		
Calib-L5	СМАМCal_L5.d	Кал.	L5	APCIautotune.m	12.05.2006 14:03		
Квантификатор							
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	БУ	Инт.	Парам. инт.
Amr	1	136.2 -> 91.4	MRM	Целевое вещество	2,102	MS-MS	
Квалификатор							
Ион-предшественник	Ион-продукт	Переход	Отн. отклик	Неопределенность	Парам. инт.		
136.2	119.4	136.2 -> 119.4	28,3	20,0			

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

Задание 5. Установка интегратора

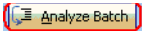
- 4 Выберите пункт **МС-МС** в раскрывающемся меню.



- 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 Щелкните значок **Анализировать серию**  на панели инструментов, чтобы начать анализ серии.
- 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).

Проба:  Calib-L5 Тип пробы: <Все>

Проба							Метод Amp
		Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.
		Blank-1	CMAMBik_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48	
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5000
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5,0000
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5000
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25,0000
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125,0000
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0000
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0000
		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	

Сообщение о флагах выбросов

Сообщение о количественном анализе

- 4 Выберите **Файл > Сохранить серию**.
- 5 Выберите **Файл > Закрыть серию**, чтобы закрыть серию.

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

- Задание 1. Отладка новой серии 27
- Задание 2. Отладка нового метода для серии 30
- Задание 3. Отладка целевых соединений 34
- Задание 4. Отладка количественного анализа 35
- Задание 5. Анализ и сохранение метода 37

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, выбрав **Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (Q-TOF)** в меню Пуск.

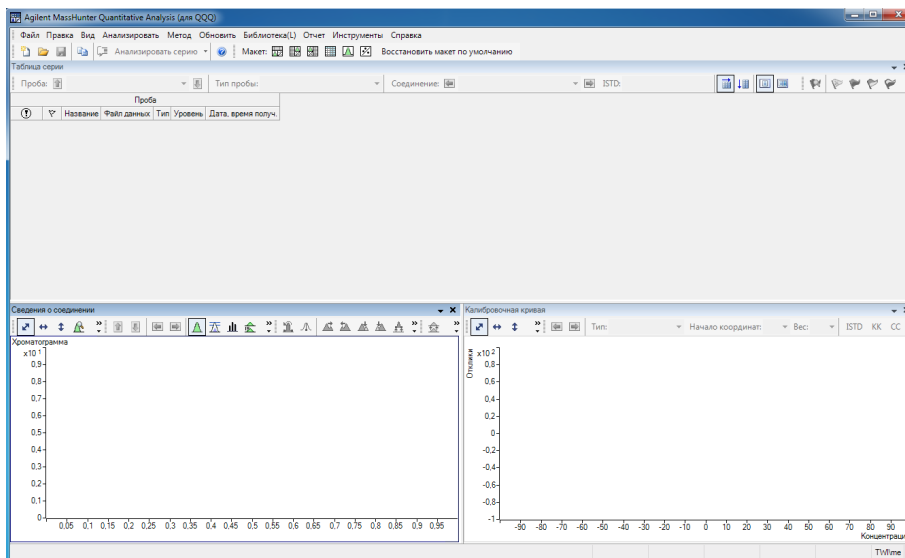


Рис. 4. Макет по умолчанию

- 2 Выберите **Файл > 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 нажмите кнопку **Создать**.

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

Задание 1. Отладка новой серии

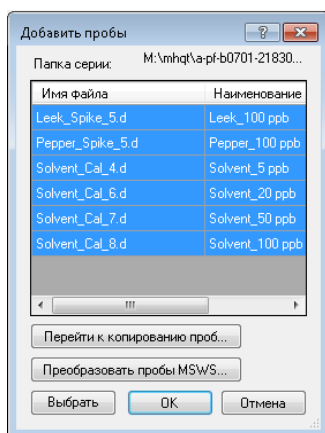
Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем создавать новую серию.

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. 29.

- 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

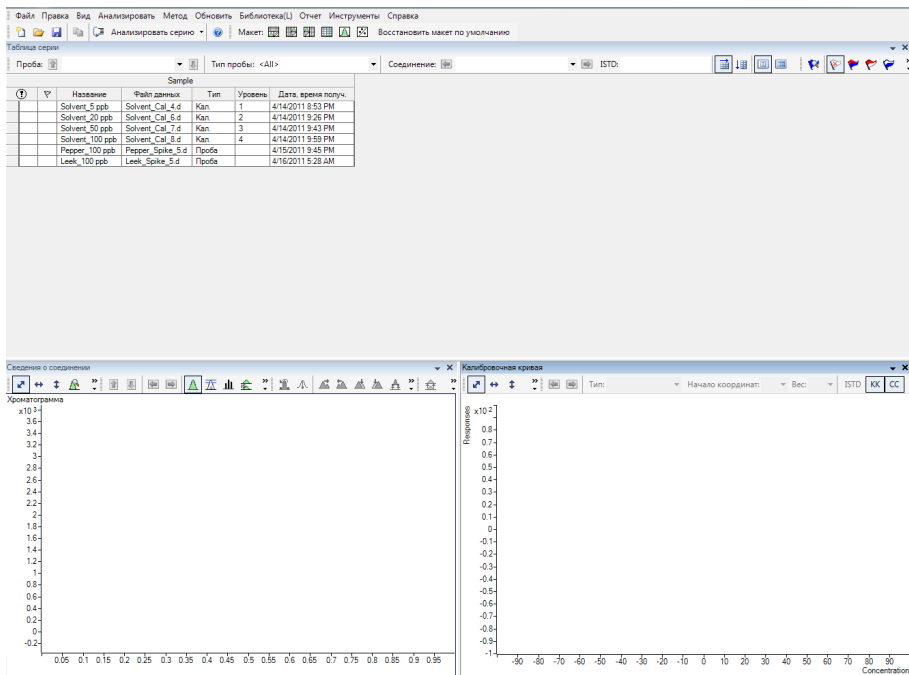


Рис. 5. Таблица серии, содержащая пробы (до выполнения количественного анализа)

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 SEF 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:		<All>	
Sample						
?		Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.
		Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Кал.	1	4/14/2011 8:53 PM
		Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Кал.	2	4/14/2011 9:26 PM
		Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Кал.	3	4/14/2011 9:43 PM
	▶	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Кал.	4	4/14/2011 9:59 PM
		Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Проба		4/15/2011 9:45 PM
		Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Проба		4/16/2011 5:28 AM

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

Задание 2. Отладка нового метода для серии

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

В левой части экрана отобразится столбец **Задачи метода**, как показано на **Рис. 6** на стр. 31.

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

- 3 Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем создавать новый метод.

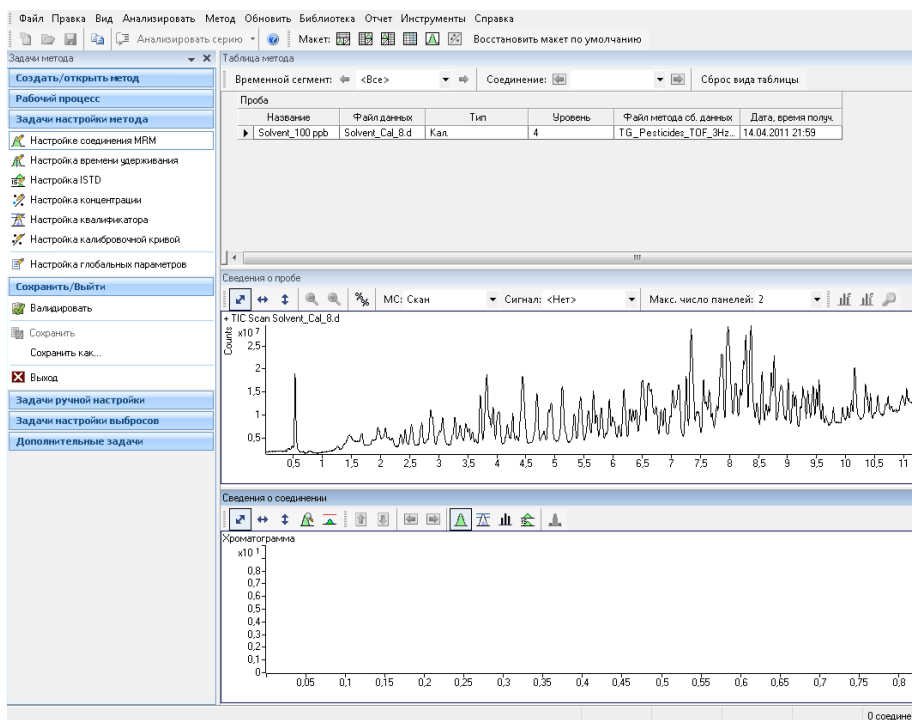


Рис. 6. Режим редактирования метода

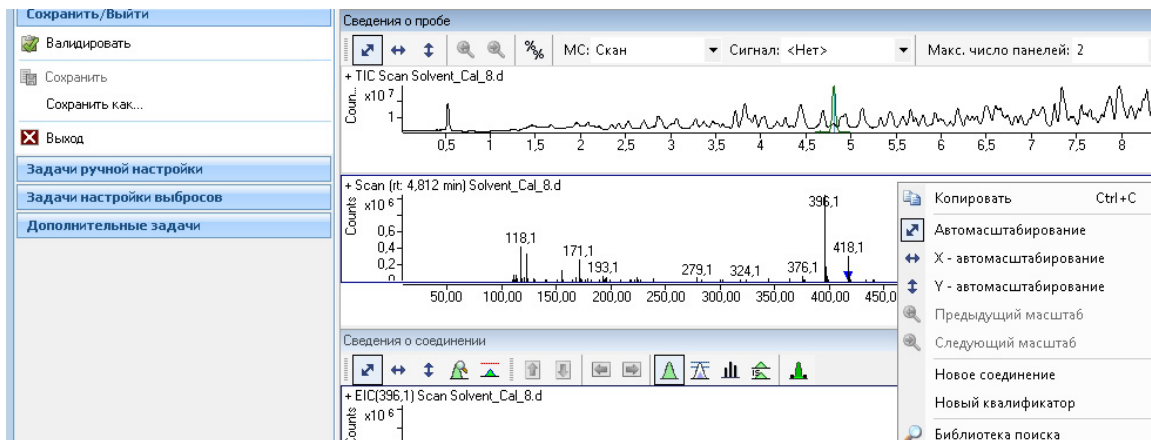
- 4 В окне **Сведения о пробе** щелкните пик посередине в районе отметки 4,82 на оси x. Щелкните правой кнопкой мыши и выберите **Извлечь спектр**.

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.



- 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

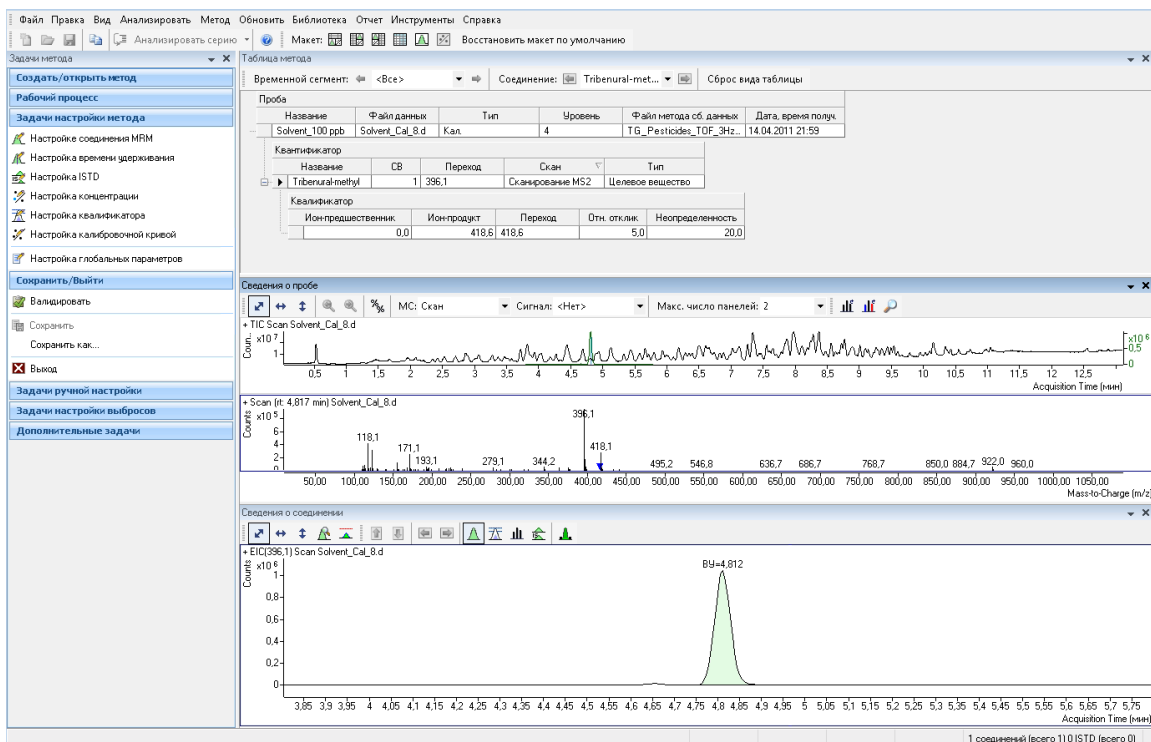
Задание 2. Отладка нового метода для серии

- 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.



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, 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.

Проба					
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода об. данных	Дата, время получ.
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Кал.	4	TG_Pesticides_TOF_3Hz...	14.04.2011 21:59

Квантификатор								
Название	СВ	Переход	Сканирование MS2	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дельты ВУ
Tribenuron-meth...	1	396,1	Сканирование MS2	Целевое вещество	4,801	0,200	0,200	Minutes

Задание 4. Отладка количественного анализа

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

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

- 1 В главном меню выберите **Метод > 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

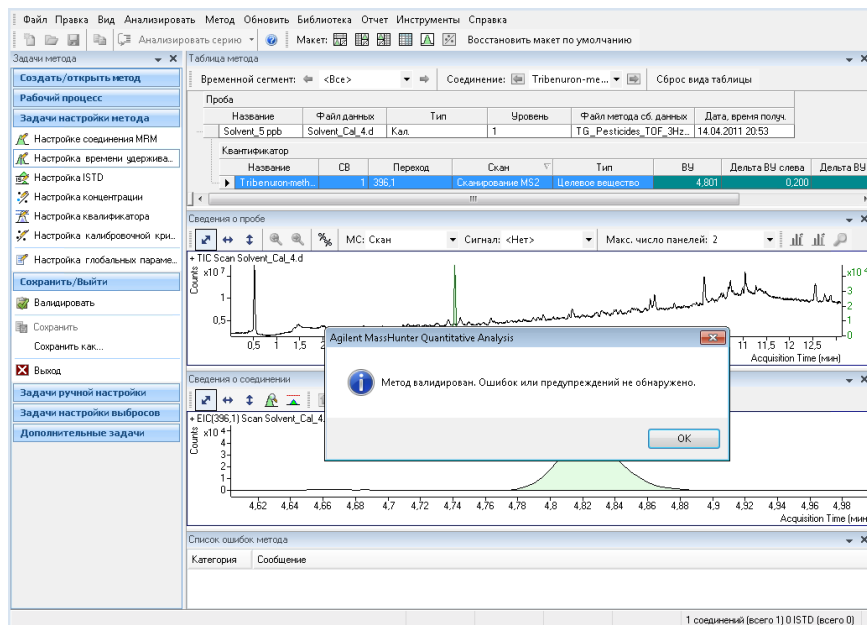
Таблица метода										
Временной сегмент: <Все>			Соединение: T1benuron-me...			Сброс вида таблицы				
Проба										
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.					
Solvent_100.ppb	Solvent_Cal_8.d	Кал.	4	T6_Pesticides_TOF_3Hz...	14.04.2011 21:59					
Квантификатор										
Название	СВ	Переход	Скан	Тип	ВУ	Дельта ВУ слева	Дельта ВУ справа	Единицы дел		
T1benuron-meth...	1	396,1	Сканирование MS2	Целевое вещество	4,801	0,200	0,200	Minutes		
Калибровка										
Уровень	Конц.	Отклик	Включить							
1	2,5000		<input checked="" type="checkbox"/>							
2	20,0000		<input checked="" type="checkbox"/>							
3	50,0000		<input checked="" type="checkbox"/>							
4	100,0000		<input checked="" type="checkbox"/>							

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.




- 4 Когда появится сообщение о валидации, нажмите кнопку **OK**.
- 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?**

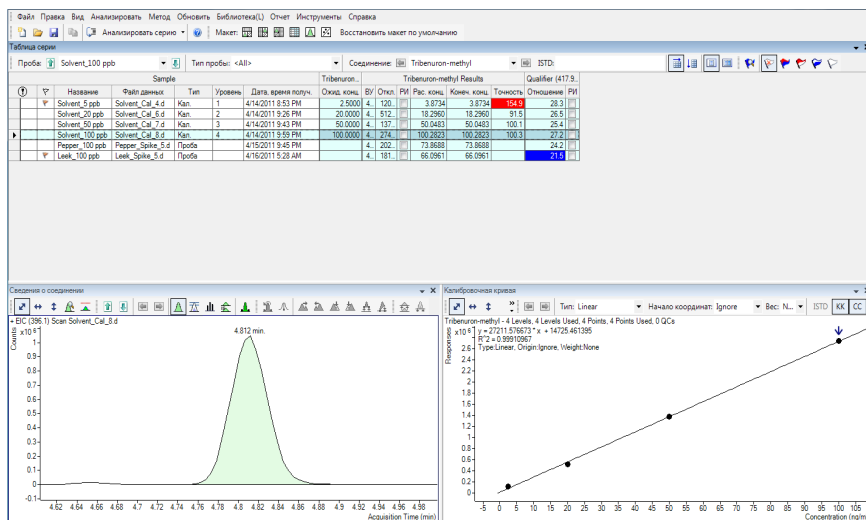
3 Упражнение 2: Отладка и количественный анализ серии полученных файлов данных Q-TOF

Задание 5. Анализ и сохранение метода

Задание 5. Анализ и сохранение метода

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

- 1 Щелкните значок **Анализировать серию**  на панели инструментов, чтобы начать анализ серии.



- 2 Выберите **Файл > Сохранить серию**.
- 3 Выберите **Файл > Закреть 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 40

Задание 2. Изменение макетов окна результатов 44

Задание 3. Экспорт и печать результатов 50

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

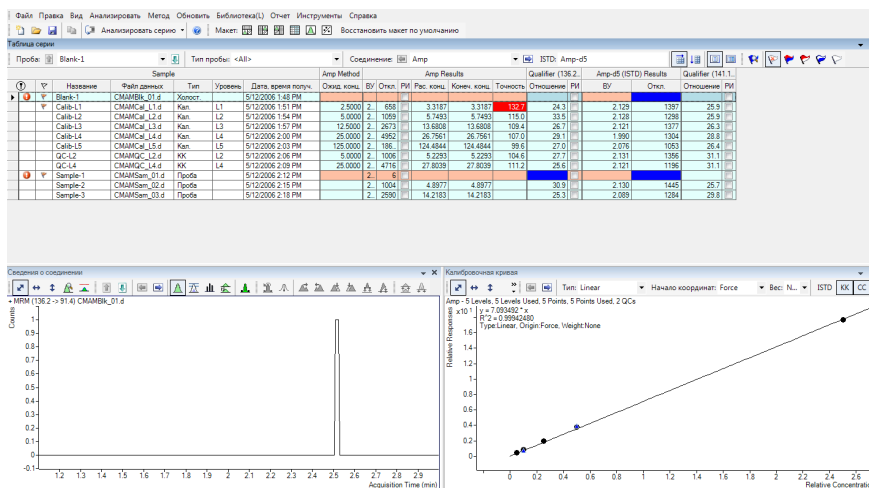
Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

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 Щелкните значок **Открыть серию**  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно **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.
- 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. 44.

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 Щелкните 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**.



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

4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

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.

Соединение:  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.

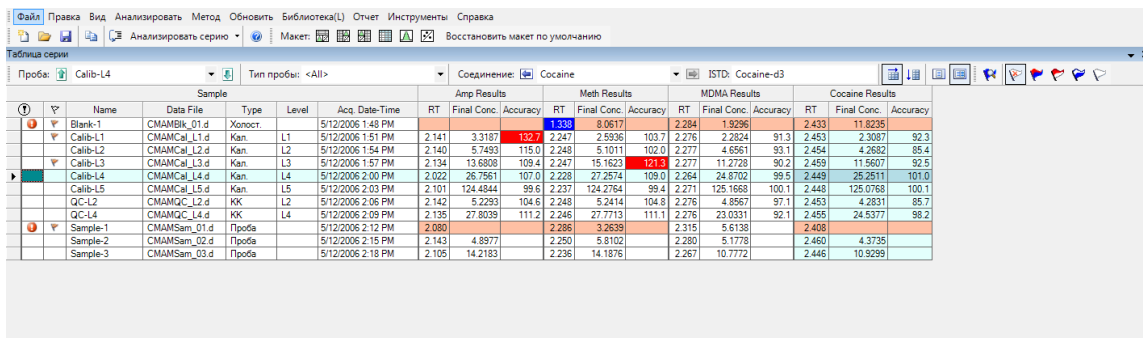
Просмотрите ВУ для каждого соединения пробы Cal-L4.

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

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



- 2 Щелкните ячейку Cal-L4 и обратите внимание на различия **ВУ** в окне **Сведения о соединении** для каждого соединения.



Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	RT	Amp Results		Meth Results		MDMA Results		Cocaine Results				
							Final Conc.	Accuracy	RT	Final Conc.	Accuracy	RT	Final Conc.	Accuracy	RT	Final Conc.	Accuracy
Blank-1	CMAMBlk_01.d		Холост.		5/12/2006 1:48 PM			1.338	8.0617	2.284	1.9296	2.433	11.8235				
Calib-L1	CMAMCal_L1.d		Кал.	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.141	3.3187	132.7	2.247	2.5936	103.7	2.276	2.2824	91.3	2.453	2.3087	92.3
Calib-L2	CMAMCal_L2.d		Кал.	L2	5/12/2006 1:54 PM	2.140	5.7493	115.0	2.248	5.1011	102.0	2.277	4.6561	93.1	2.454	4.2682	85.4
Calib-L3	CMAMCal_L3.d		Кал.	L3	5/12/2006 1:57 PM	2.134	13.6808	109.4	2.247	15.1633	121.8	2.277	11.2728	90.2	2.459	11.5607	92.5
Calib-L4	CMAMCal_L4.d		Кал.	L4	5/12/2006 2:00 PM	2.022	26.7561	107.0	2.228	27.2574	109.0	2.264	24.8702	99.5	2.449	25.2511	101.0
Calib-L5	CMAMCal_L5.d		Кал.	L5	5/12/2006 2:03 PM	2.101	124.4844	99.6	2.237	124.2764	99.4	2.271	125.1668	100.1	2.448	125.0768	100.1
QC-L2	CMAMQC_L2.d		КК	L2	5/12/2006 2:06 PM	2.142	5.2293	104.6	2.248	5.2414	104.8	2.276	4.8567	97.1	2.453	4.2831	85.7
QC-L4	CMAMQC_L4.d		КК	L4	5/12/2006 2:09 PM	2.135	27.8039	111.2	2.246	27.7713	111.1	2.276	23.0331	92.1	2.455	24.5377	98.2
Sample-1	CMAMSam_01.d		Проба		5/12/2006 2:12 PM	2.080		2.286	3.2698	2.315	5.5138				2.466		
Sample-2	CMAMSam_02.d		Проба		5/12/2006 2:15 PM	2.143	4.8977		2.250	5.8102		2.280	5.1778		2.450		4.3735
Sample-3	CMAMSam_03.d		Проба		5/12/2006 2:18 PM	2.105	14.2183		2.236	14.1876		2.267	10.7772		2.446		10.9299

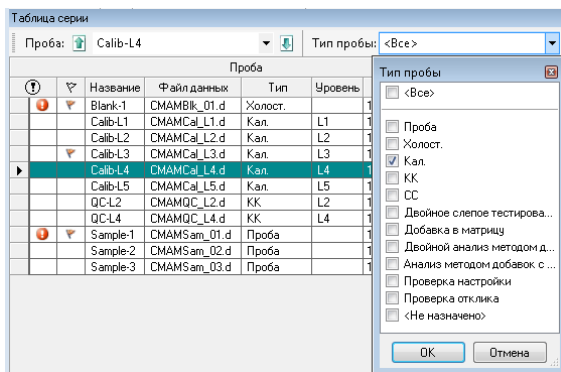
4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 1. Переход к результатам таблицы серии

- Чтобы вернуться к отображению подробных результатов количественного анализа для выбранного целевого соединения, щелкните значок **В таблице серии отображать одно соединение/пробу** на панели инструментов. 
- 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.

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






- Нажмите **ОК**.
Окно **Таблица серии** должно содержать только стандарты **Кал.** для кокаина.
- Щелкните раскрывающую стрелку возле списка **Тип пробы**.
- 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 панели инструментов щелкните значок **Макет - таблица слева** .
- 2 На панели инструментов щелкните значок **Макет - таблица справа** .
- 3 Щелкните значок **Макет - таблица вверх** .

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

- 1 На панели инструментов щелкните значок **Развернуть таблицу** .
- 2 На панели инструментов щелкните значок **Развернуть сведения о соединении** .
- 3 На панели инструментов щелкните значок **Развернуть калибровочную кривую** .
- 4 Чтобы вернуться к макету по умолчанию, щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов.

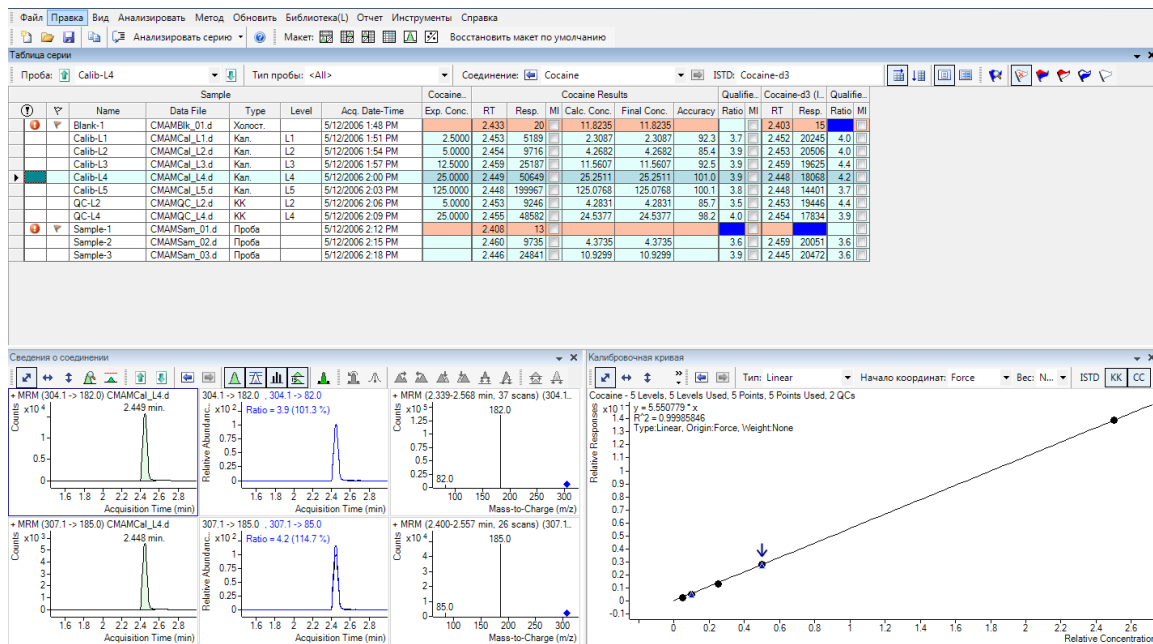
Шаг 3 Смените панели в окне «Сведения о соединении» для Cal-L4.

- 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.



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

Откроется диалоговое окно **Сохранить файл макета**.

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

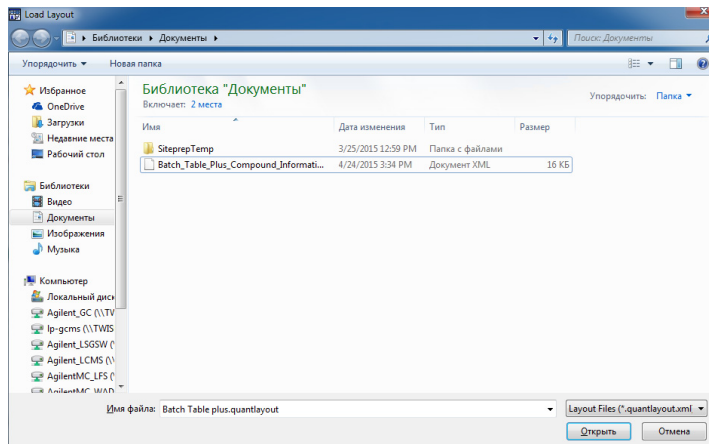
4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

Шаг 5 Загрузите вновь созданный макет.

- 1 Щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов.
- 2 Выберите **Вид > Макет окна > Загрузить макет**.

Откроется диалоговое окно **Загрузить макет**.



4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

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

Теперь окно результатов должно выглядеть как на **Рис. 7** на стр. 47.

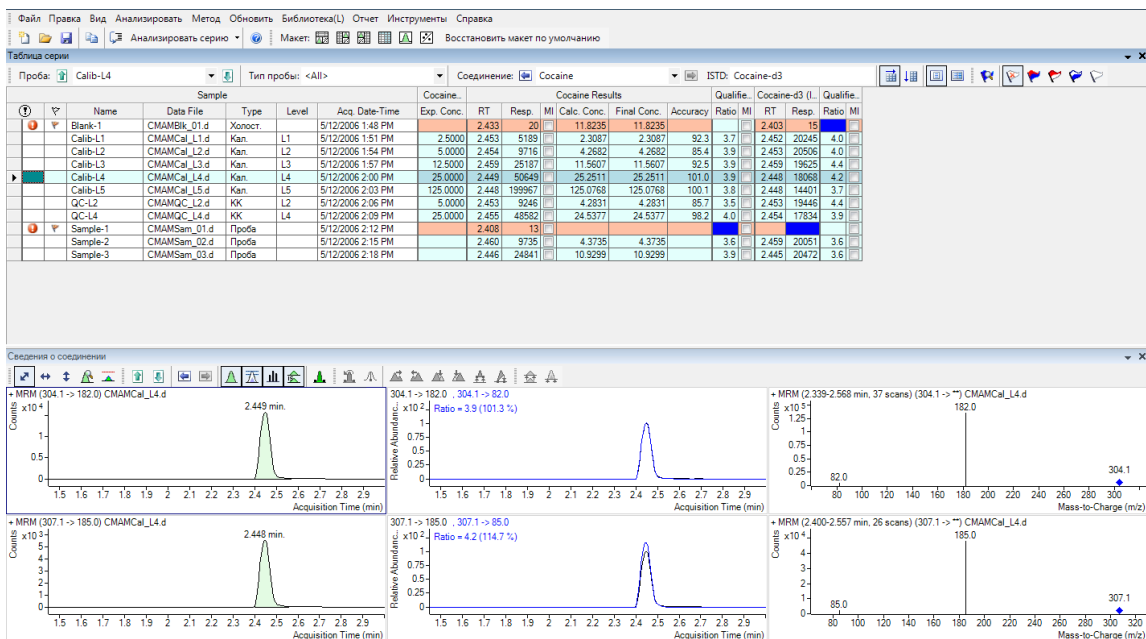
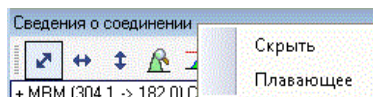


Рис. 7. Окно результатов

Шаг 6 Создайте макет, как показано на **Рис. 8** на стр. 48.

- Восстановите макет по умолчанию (щелкните значок **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов).
- Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Калибровочная кривая** и установите флажок **Плавающее**.



- Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Сведения о соединении** и установите флажок **Плавающее**.

4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

4 Измените размер окон в соответствии с макетом на Рис. 8.

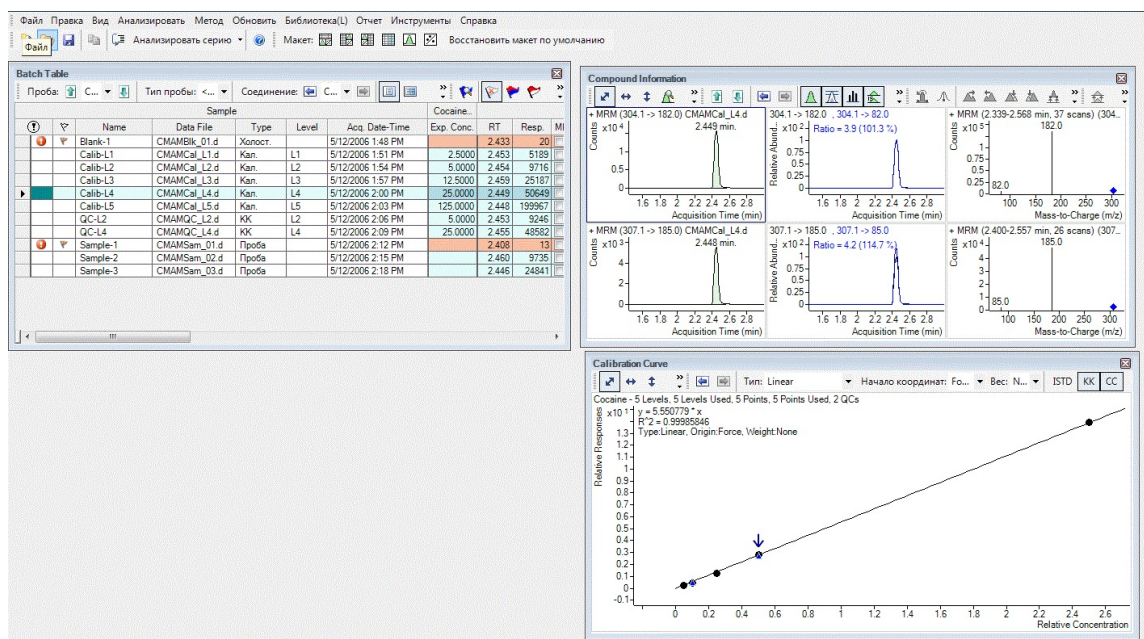


Рис. 8. Отображение с плавающими окнами калибровочной кривой и сведений о соединении

5 Щелкните правой кнопкой в строке заголовка окна **Сведения о соединении** и снимите флажок **Плавающее**.

4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 2. Изменение макетов окна результатов

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

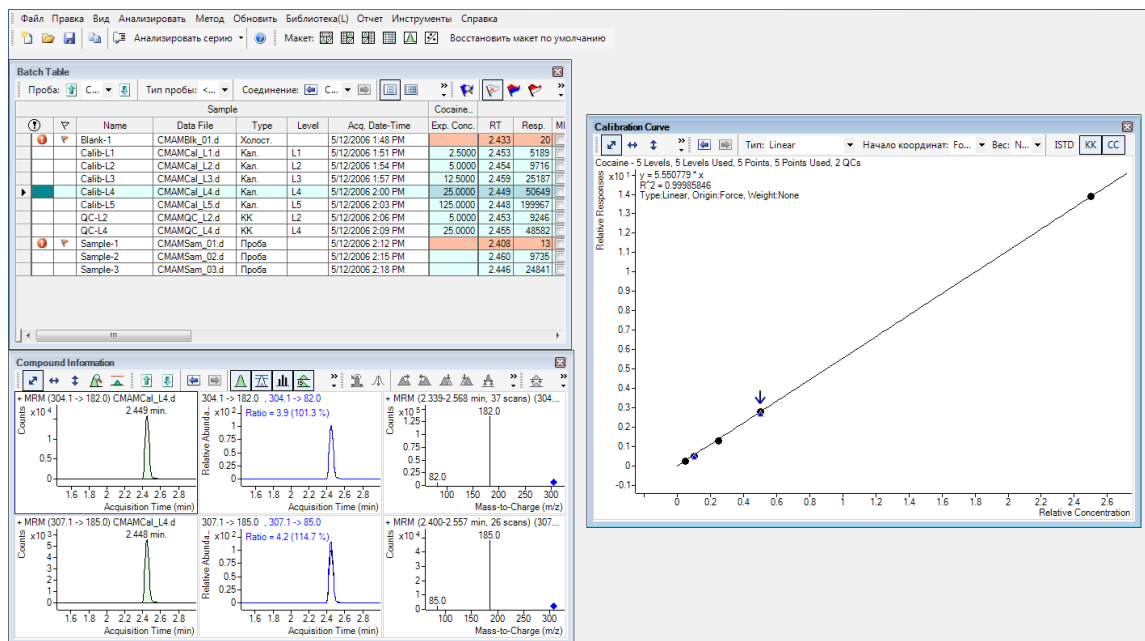


Рис. 9. Окно измененного размера

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

Шаг 7 Воссоздайте (не восстанавливайте) макет по умолчанию.

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

4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа

Задание 3. Экспорт и печать результатов

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 Выберите **Файл > Экспорт > 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

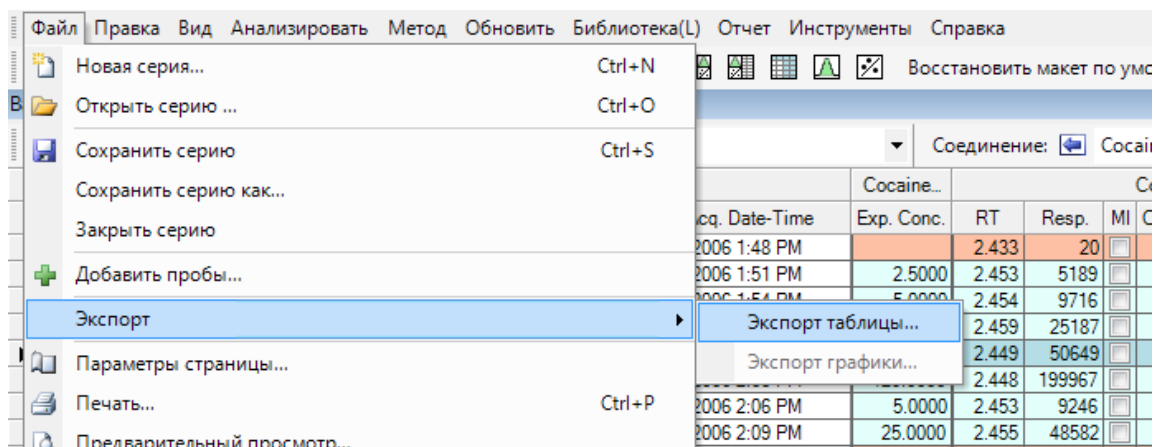


Рис. 10. Экспорт результатов

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 Апр	Результаты Апр				
	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожид. конц.	ВУ	Откл.	РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	
	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	2,1	657,5	##	3,3187124	3,3187124	
	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5	2,1	1059	##	5,7493405	5,7493404	
	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5	2,1	2673	##	13,680805	13,680805	
	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25	2	4952	##	26,756057	26,756056	
	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125	2,1	18605	##	124,48436	124,48436	
	QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5	2,1	1006	##	5,2292635	5,2292635	
	QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25	2,1	4716	##	27,803945	27,803944	
	Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12		2,1	6,035	##			

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. 50 для сведений о соединении.
- 5 Если не нужно переходить к упражнению 4, выберите **Файл > 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**.

4 Упражнение 3: Просмотр результатов количественного анализа
Задание 3. Экспорт и печать результатов

Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 1. Корректировка аппроксимации калибровочной кривой 54

Задание 2. Непараметрическое интегрирование 57

Задание 3. Обнаружение выбросов 71

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**.

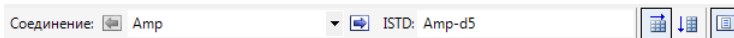
- 1 Чтобы запустить программу количественного анализа, щелкните значок **Количественный анализ (QQQ)**  на рабочем столе.
- 2 Щелкните значок **Открыть серию**  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно **Открыть серию**.
- 3 Перейдите в папку **\Ваш каталог\DrugsOfAbuse** и щелкните файл **iii_Test_01.batch.bin**.

Эту программу также можно запустить, выбрав **Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ)** в меню Пуск.

Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем открывать серию.

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

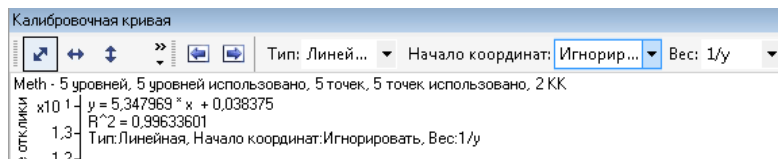
- 1 Убедитесь, что в окне **Таблица серии** задан режим отображения одного соединения и в качестве целевого соединения отображается **Amp**. См. фрагмент рисунка внизу.



- 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



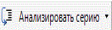
Начало координат аппроксимации кривой

- **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 Щелкните значок **Анализировать серию**  на панели инструментов, чтобы проанализировать серию.
- 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 Щелкните значок **Анализировать серию** на главной панели инструментов, чтобы проанализировать серию.
После анализа серии в окне **Таблица серии** отобразятся новые результаты.

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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

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

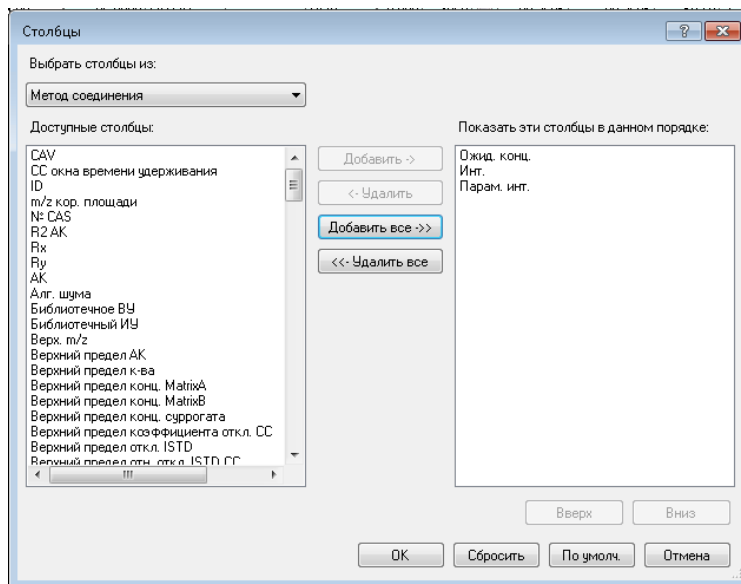
Шаг 1 Добавлять столбцы интегрирования в таблицу серии.

- 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. 54.

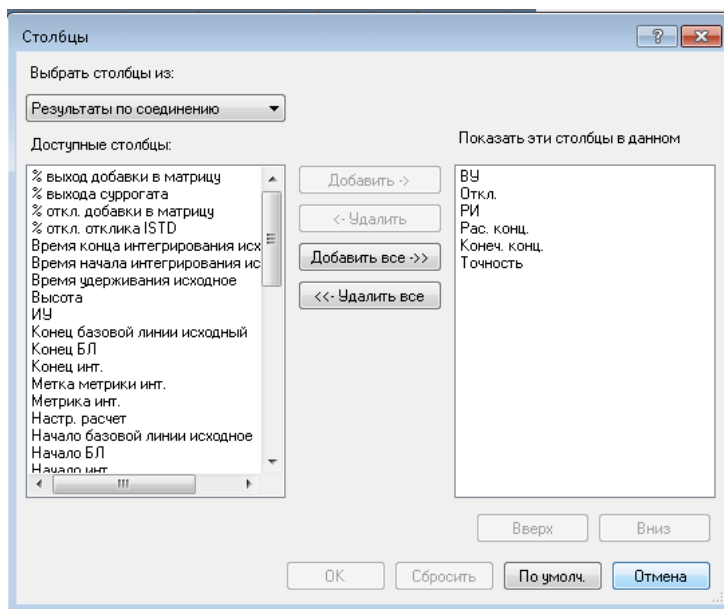


- 4 Выберите пункт **Результаты по соединению** в раскрывающемся списке **Выбрать столбцы из**.
- 5 Выберите **Метрика инт.** (метрика интегратора) в списке **Доступные столбцы** и нажмите кнопку **Добавить**. Система переместит выбранный столбец в список **Показывать эти столбцы в данном порядке**.


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 (**Amp**).
- 2 Рассмотрите используемые по умолчанию значения в столбцах **Инт.** и **Парам. инт.** в окне **Таблица серии**.

5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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

Метод Амр	
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	

- 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 Амр			Результаты Амр						
Оxid. 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.

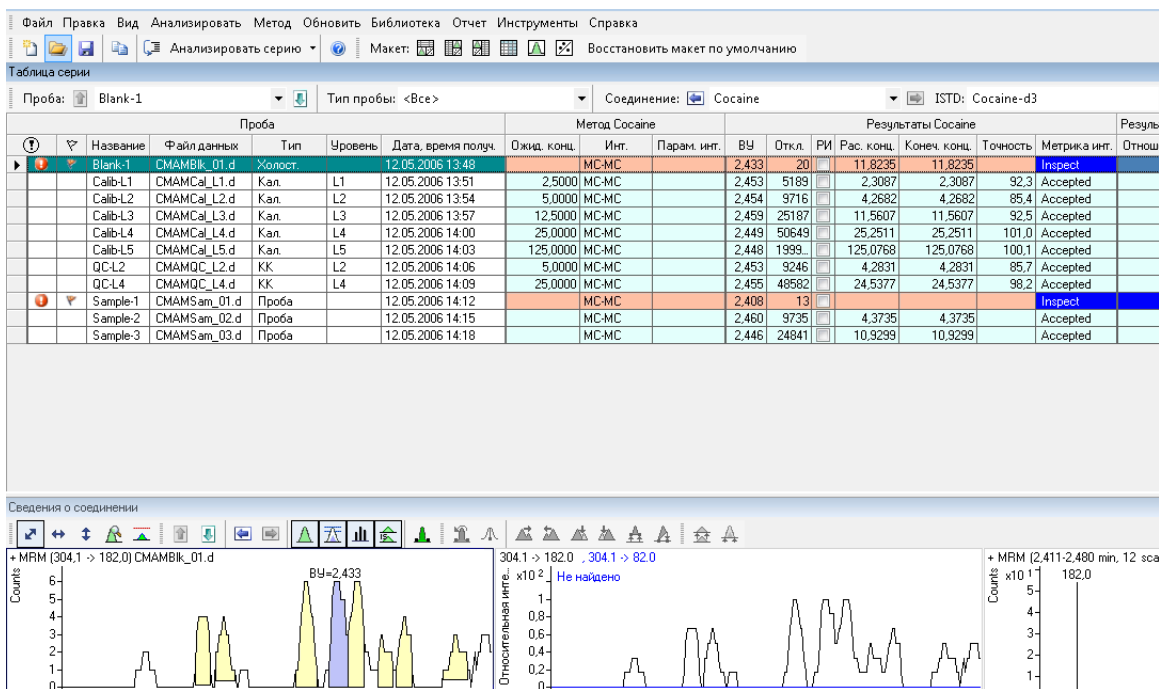
Найдите сообщения о выбросе на пересечении столбца **Метрика инт.** и строки пробы **Blank-1**.

- 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**.

5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- Щелкните по значку **Следующее соединение** на панели инструментов в окне **Таблица серии** до тех пор, пока не появится соединение **Cocaine**.
- 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».

5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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

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

Эта цвета используются также для пиков.

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 кв.		Результат...		Результаты кв.		
Ожид. конц.	Инт.	Парам. инт.	Алг. шума	ВУ	Откл.	РИ	Рас. конц.	Конеч. конц.	Точность	Метрика инт.	Отношение	РИ	ВУ	Откл.	Отношение	РИ
	МС-МС		RMS													
2,5000	МС-МС		RMS	2,141	658		3,3187	3,3187	132.7	Accepted	24.3		2,129	1397		25.9
5,0000	МС-МС		RMS	2,140	1059		5,7493	5,7493	115.0	Accepted	33.5		2,128	1298		25.9
12,5000	МС-МС		RMS	2,134	2673		13,6808	13,6808	109.4	Accepted	26.7		2,121	1377		26.3
25,0000	МС-МС		RMS	2,022	4952		26,7561	26,7561	107.0	Accepted	29.1		1,990	1304		28.8
125,0000	МС-МС		RMS	2,101	18605		124,4844	124,4844	99.6	Accepted	27.0		2,076	1053		26.4
5,0000	МС-МС		RMS	2,142	1006		5,2293	5,2293	104.6	Accepted	27.7		2,131	1356		31.1
25,0000	МС-МС		RMS	2,135	4716		27,8039	27,8039	111.2	Accepted	25.6		2,121	1196		31.1
	МС-МС		RMS	2,080	6					Rejected						
	МС-МС		RMS	2,143	1004		4,8977	4,8977		Accepted	30.9		2,130	1445		25.7
	МС-МС		RMS	2,105	2590		14,2183	14,2183		Accepted	25.3		2,089	1284		29.8

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

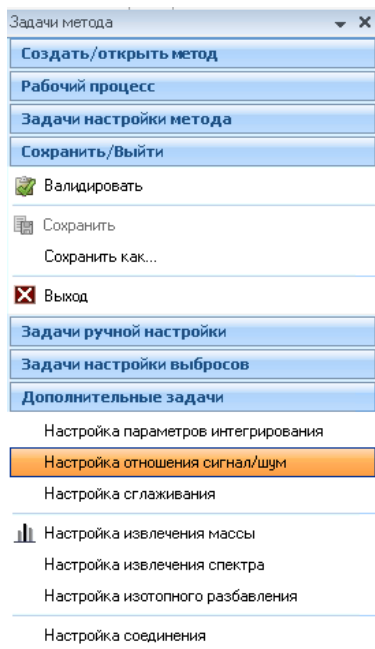
- Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить в режим редактирования метода.

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**.

Области шума	Алг. шума
	ASTM
	Peak-to-Peak
	Peak-to-Peak from Drift
	ASTM
	RMS
	Auto-RMS

- 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

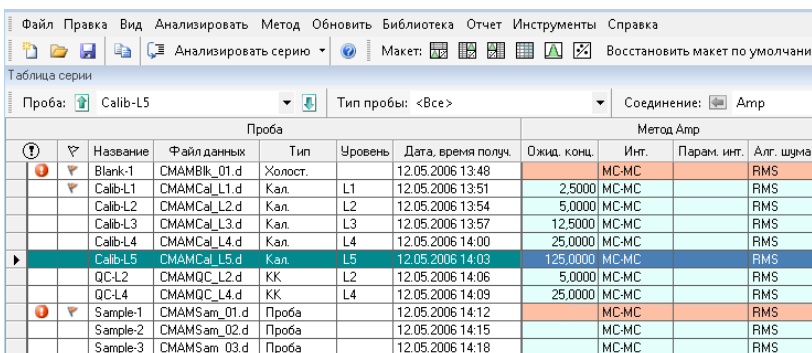
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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) и щелкните значок **Развернуть сведения о соединении** на панели инструментов.

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

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



The screenshot shows the software interface with a menu bar (Файл, Правка, Вид, Анализировать, Метод, Обновить, Библиотека, Отчет, Инструменты, Справка) and a toolbar. Below the toolbar, there are dropdown menus for 'Проба: Calib-L5', 'Тип пробы: <Все>', and 'Соединение: Амр'. The main area contains a table with the following data:

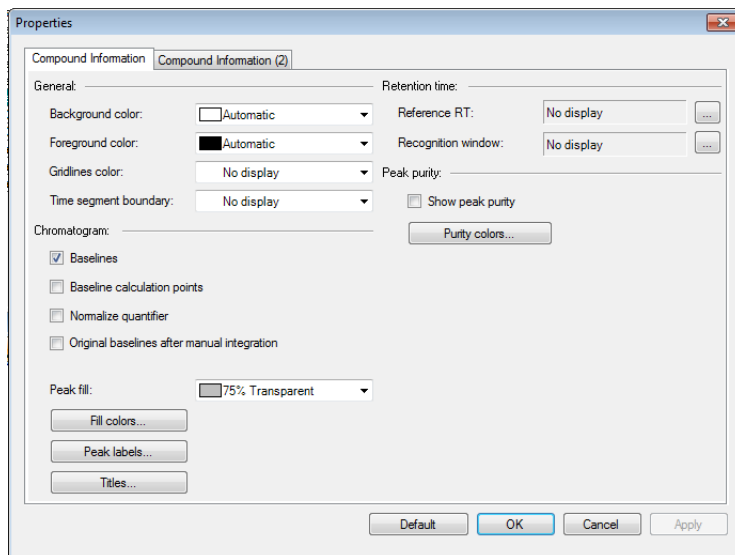
Проба						Метод Амр			
Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	Ожд. конц.	Инт.	Парам. инт.	Алг. шума	
Blank-1	CMAMBlk_01.d	Холост.		12.05.2006 13:48		МС-МС		RMS	
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Кал.	L1	12.05.2006 13:51	2,5000	МС-МС		RMS	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Кал.	L2	12.05.2006 13:54	5,0000	МС-МС		RMS	
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Кал.	L3	12.05.2006 13:57	12,5000	МС-МС		RMS	
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Кал.	L4	12.05.2006 14:00	25,0000	МС-МС		RMS	
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Кал.	L5	12.05.2006 14:03	125,0000	МС-МС		RMS	
QC-L2	CMAMQC_L2.d	КК	L2	12.05.2006 14:06	5,0000	МС-МС		RMS	
QC-L4	CMAMQC_L4.d	КК	L4	12.05.2006 14:09	25,0000	МС-МС		RMS	
Sample-1	CMAMSam_01.d	Проба		12.05.2006 14:12		МС-МС		RMS	
Sample-2	CMAMSam_02.d	Проба		12.05.2006 14:15		МС-МС		RMS	
Sample-3	CMAMSam_03.d	Проба		12.05.2006 14:18		МС-МС		RMS	

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

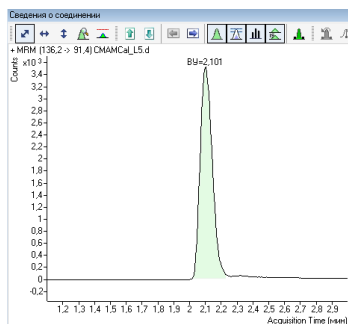
5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 2. Непараметрическое интегрирование

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



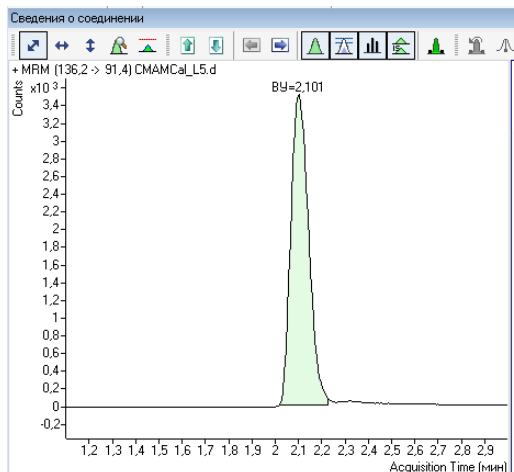
- 4 В диалоговом окне **Свойства** снимите флажок «Базовые линии».
- 5 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на пик без базовой линии. Обратите внимание на то, что после снятия флажка базовых линий они исчезают.



5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

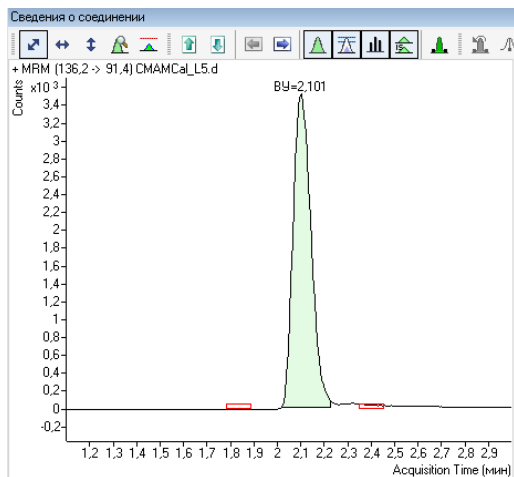
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 6 В диалоговом окне **Свойства** установите флажок **Базовые линии**.
- 7 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на пик с базовой линией.



Шаг 7 Проверьте точки расчета базовой линии для амфетамина.

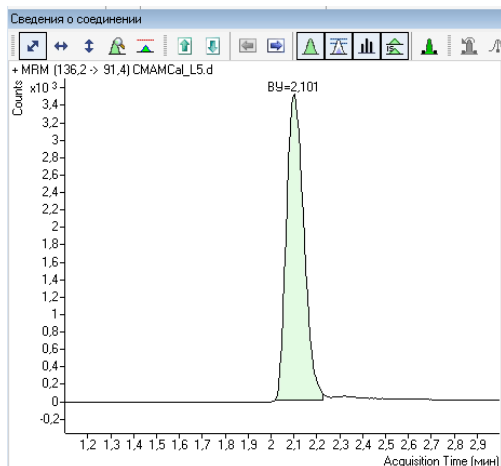
- 1 В диалоговом окне **Свойства** установите флажок **Точки расчета базовой линии**.
- 2 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите, где начинается и заканчивается базовая линия.



5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

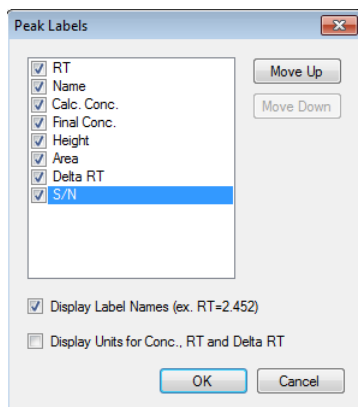
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 3 В диалоговом окне **Свойства** снимите флажок **Точки расчета базовой линии**.
- 4 Нажмите кнопку **Применить** и посмотрите на хроматограммы.
- 5 Сравните хроматограммы с точками расчета базовой линии и без них.



Шаг 8 Отобразите метки пика для амфетамина.

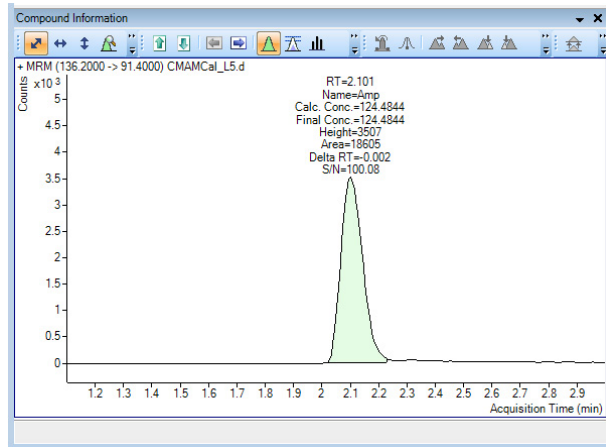
- 1 В диалоговом окне **Свойства** нажмите кнопку **Метки пиков**. Откроется диалоговое окно **Метки пиков**.
- 2 Установите все флажки **Метки пиков** и флажок **Отображать имена меток**.
- 3 Нажмите **ОК**.



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.

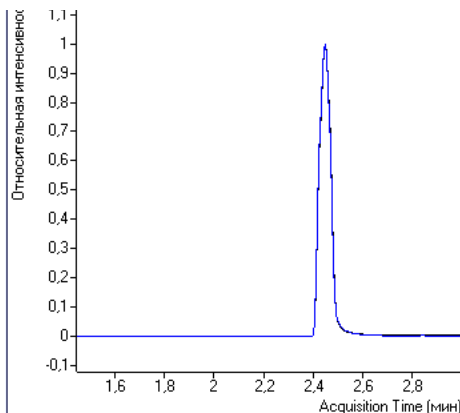
- 1 Перейдите на вкладку **Сведения о соединении (2)**. Установите флажок **Нормализовать** в разделе **Квалификаторы**.

5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

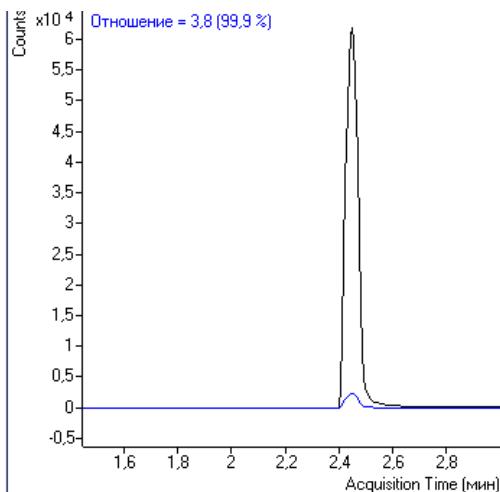
Задание 2. Непараметрическое интегрирование

- 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.

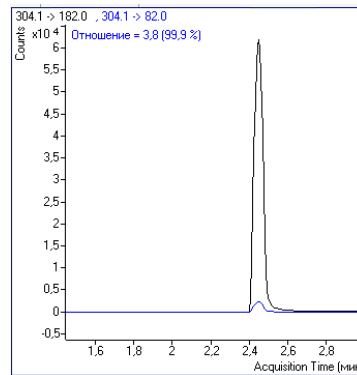
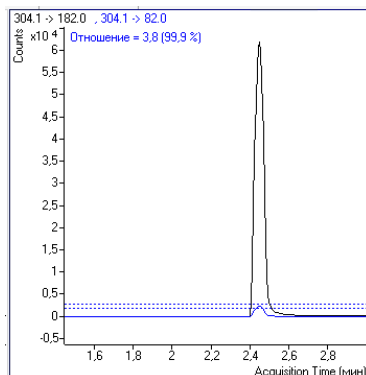


5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

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 Нажмите кнопку **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

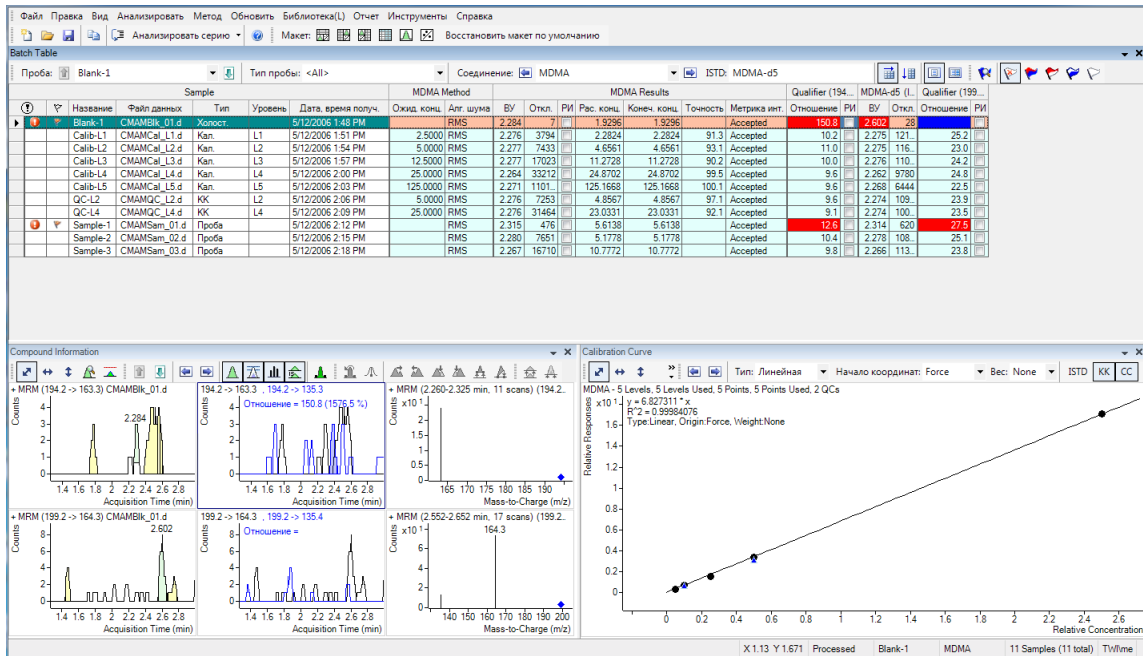
Задание 3. Обнаружение выбросов

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.

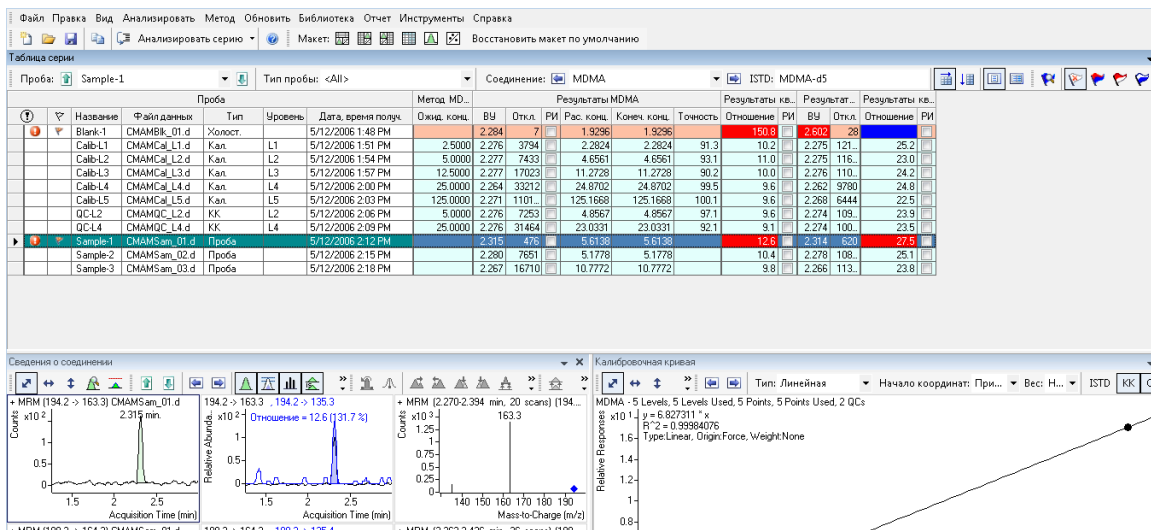
- Щелкните по значку **Следующее соединение** на панели инструментов в окне **таблицы серии** до тех пор, пока не появится соединение MDMA.
- Выберите строку **Blank-1** и установите курсор на столбец **ВУ**, как показано в приведенном ниже примере.




5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 3. Обнаружение выбросов

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



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

- Щелкните значок **Предыдущее соединение** на панели инструментов  до тех пор, пока не появится соединение **Amp**.
- Выберите в таблице строку **Calib-L5**.
- Выберите **Метод > Правка**, чтобы переключить 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.

Проба		Тип	Уровень	Файл метода сб. данных	Дата, время получ.
Blank-1	SMAMBIK	пост.		APC\autotune.m	12.05.2006 13:48

Название	CE	реход	Скан	Тип	Макс. % откл. точности	Умножитель точности ПКО
Amp		91.4	MRM	Целевое вещество	5,0	1,0
Amp-d5		93.4	MRM	ISTD	20,0	1,0
Cocaine		182.0	MRM	Целевое вещество	20,0	1,0
Cocaine-d3		185.0	MRM	ISTD	20,0	1,0
MDMA		163.3	MRM	Целевое вещество	20,0	1,0
MDMA-d5		164.3	MRM	ISTD	20,0	1,0
Meth		119.3	MRM	Целевое вещество	20,0	1,0
Meth-d5		92.3	MRM	ISTD	20,0	1,0

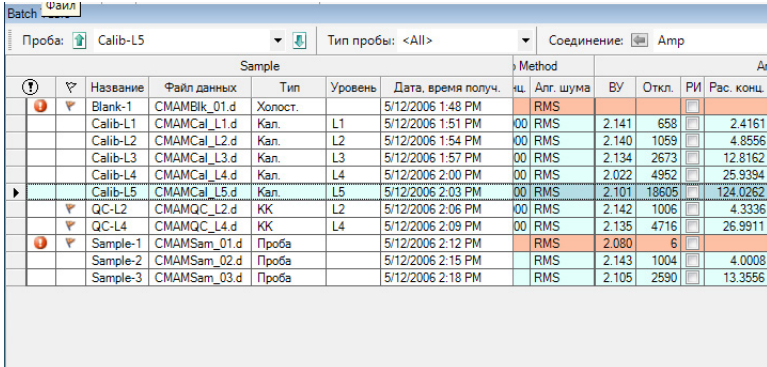
- 6 В столбце **Задачи метода** нажмите **Сохранить/Выйти > Выход**, затем выберите **Нет** в разделе **Дополнительная обработка серии** после применения метода и нажмите кнопку **Да** в ответ на запрос **Применить этот метод к серии?**

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 синие (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**.



Sample						Method					Ar
Имя	Название	Файл данных	Тип	Уровень	Дата, время получ.	щ.	Алг. шума	ВУ	Откл.	PII	Рас. конц.
	Blank-1	СМАМBlk_01.d	Холост.		5/12/2006 1:48 PM						
	Calib-L1	СМАМCal_L1.d	Кап.	L1	5/12/2006 1:51 PM	00	RMS	2.141	658		2.4161
	Calib-L2	СМАМCal_L2.d	Кап.	L2	5/12/2006 1:54 PM	00	RMS	2.140	1059		4.8556
	Calib-L3	СМАМCal_L3.d	Кап.	L3	5/12/2006 1:57 PM	00	RMS	2.134	2673		12.8162
	Calib-L4	СМАМCal_L4.d	Кап.	L4	5/12/2006 2:00 PM	00	RMS	2.022	4952		25.9394
	Calib-L5	СМАМCal_L5.d	Кап.	L5	5/12/2006 2:03 PM	00	RMS	2.101	18605		124.0262
	QC-L2	СМАМQC_L2.d	КК	L2	5/12/2006 2:06 PM	00	RMS	2.142	1006		4.3336
	QC-L4	СМАМQC_L4.d	КК	L4	5/12/2006 2:09 PM	00	RMS	2.135	4716		26.9911
	Sample-1	СМАМSam_01.d	Проба		5/12/2006 2:12 PM		RMS	2.080	6		
	Sample-2	СМАМSam_02.d	Проба		5/12/2006 2:15 PM		RMS	2.143	1004		4.0008
	Sample-3	СМАМSam_03.d	Проба		5/12/2006 2:18 PM		RMS	2.105	2590		13.3556

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 Щелкните значок **Выбор выбросов** , чтобы открыть диалоговое окно **Выбросы**.
- 6 Снимите флажки **Точность** и **Время удерживания** и нажмите кнопку **ОК**.

5 Упражнение 4: Использование трех инструментов для оценки результатов

Задание 3. Обнаружение выбросов

- 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.

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 Щелкните значок **Открыть серию**  на панели инструментов, чтобы отобразить диалоговое окно **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, выбрав **Программы > Agilent > MassHunter Workstation > Количественный анализ (QQQ)** в меню Пуск.

Если используемый по умолчанию макет отсутствует, нажмите кнопку **Восстановить макет по умолчанию** на панели инструментов, прежде чем открывать серию.

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

- 1 При открытой таблице серии нажмите кнопку **Анализировать серию** на панели инструментов, чтобы получить результаты.
- 2 Выберите **Файл > Сохранить**, чтобы сохранить серию.

Отчеты о количественном анализе содержат сведения о пробах, сформированные во время анализа серии. Функция составления отчетов не будет работать до тех пор, пока не будет выполнен количественный анализ проб и сохранены результаты.

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

Шаг 3 Создайте метод отчета в формате PDF.

- 1 На панели инструментов выберите **Отчет > Сформировать**.
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.

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.

6 Упражнение 5: Создание отчетов о количественном анализе

- В отчетах Excel имеются ограничения на размер бумаги. В отчетах PDF предусмотрен выбор вариантов.
- Кроме того, можно выбрать **Формат публикации**. Для отчетов в формате PDF доступен только один формат публикации, поэтому данное поле затенено в этом примере.

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.
- 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.

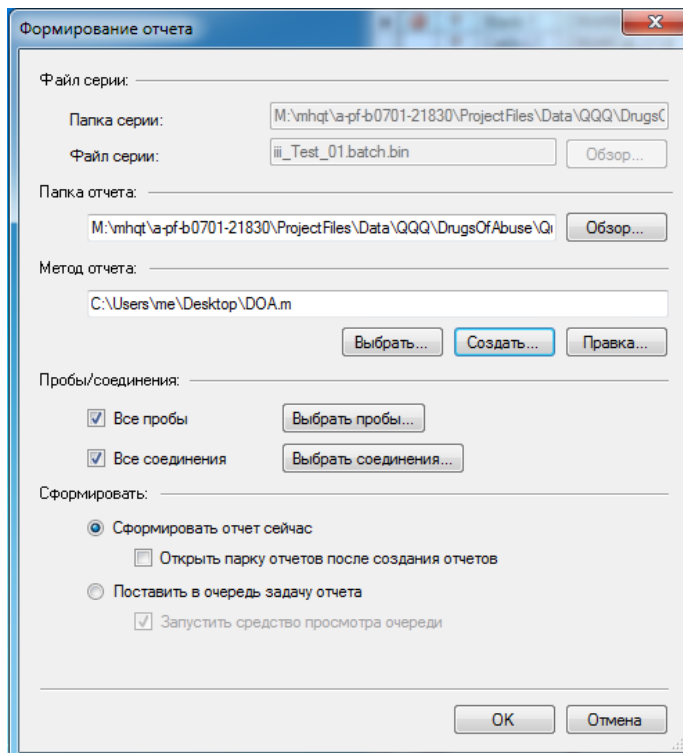
Шаг 7 Сохраните метод отчета.

- 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.

Имя	Дата изменена	Тип	Размер
 DrugAnalysis_000_CMAMBIk_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	95 KB
 DrugAnalysis_001_CMAMCal_L1.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_002_CMAMCal_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_003_CMAMCal_L3.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_004_CMAMCal_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_005_CMAMCal_L5.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_006_CMAMQC_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_007_CMAMQC_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_008_CMAMSam_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	98 KB
 DrugAnalysis_009_CMAMSam_02.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_010_CMAMSam_03.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	166 KB

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	84
Методы количественного анализа	89
Непараметрический интегратор	90
Краткий обзор серии: Результаты	92
Краткий обзор соединений	93
Подтверждение соединения	95
Калибровка соединения	97

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, $1/x$, $1/x^2$, $1/y$, $1/y^2$, 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.

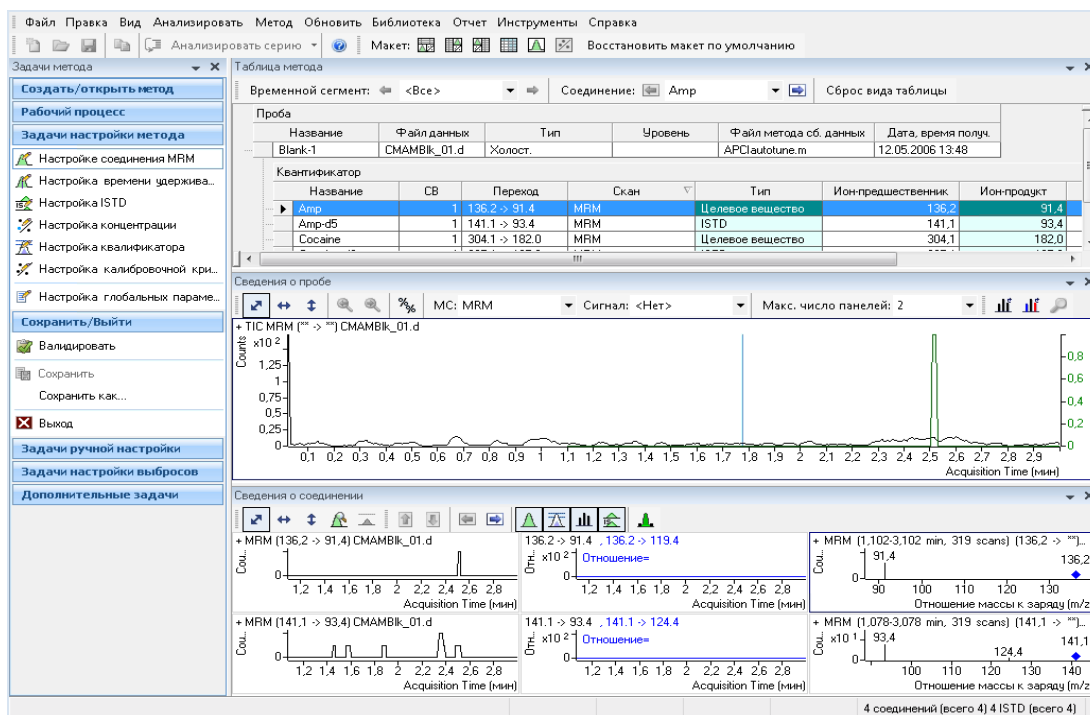


Рис. 12. Количественное представление – Редактор метода

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.

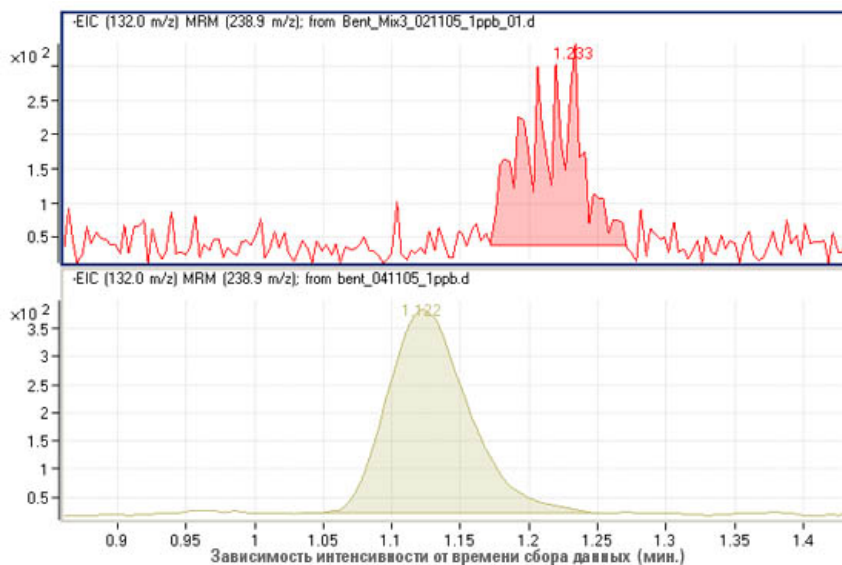


Рис. 13. Непараметрический интегратор — данные с двумя экстремумами

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**.

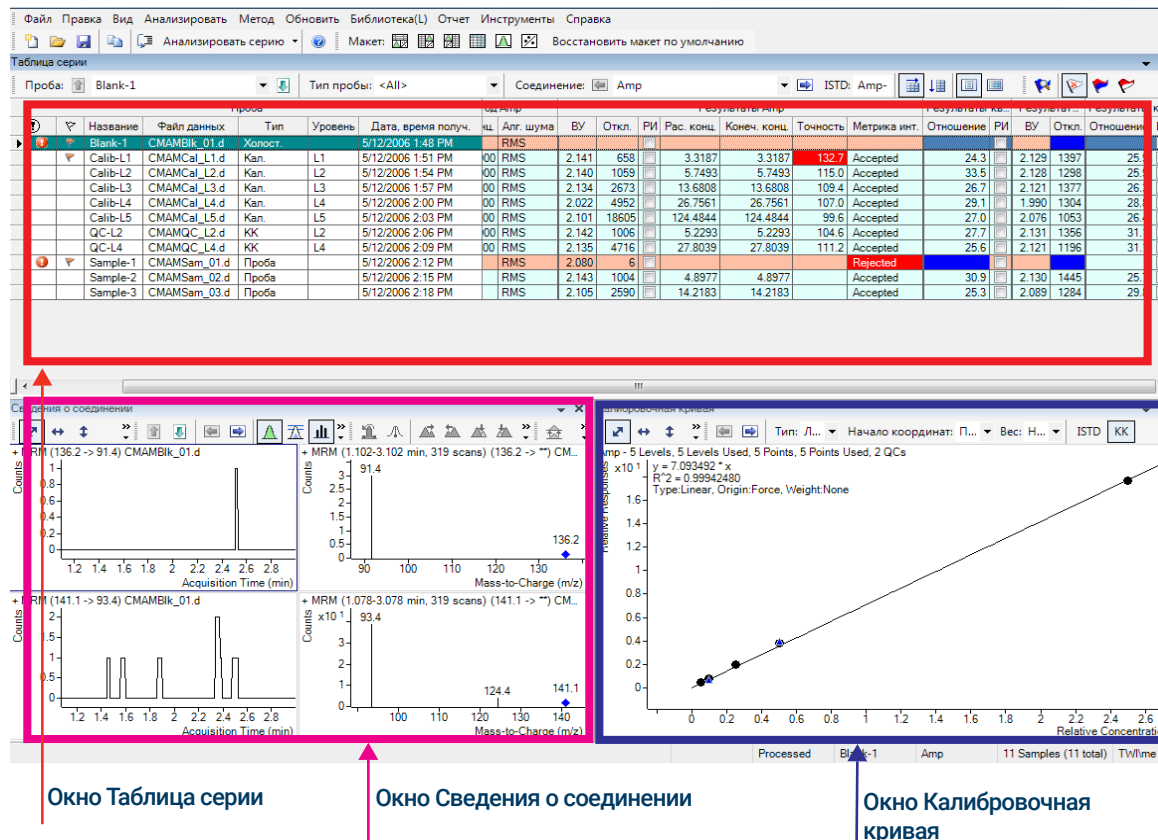


Рис. 14. Результаты по амфетамину

- 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.

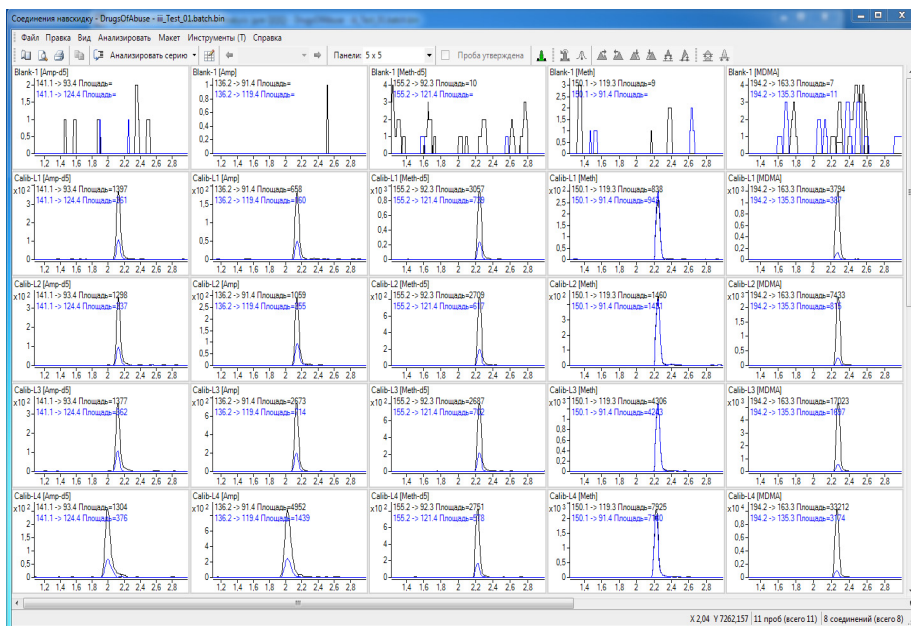


Рис. 15. Краткий обзор функции Соединения навскидку в программе Quantitative Analysis

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.

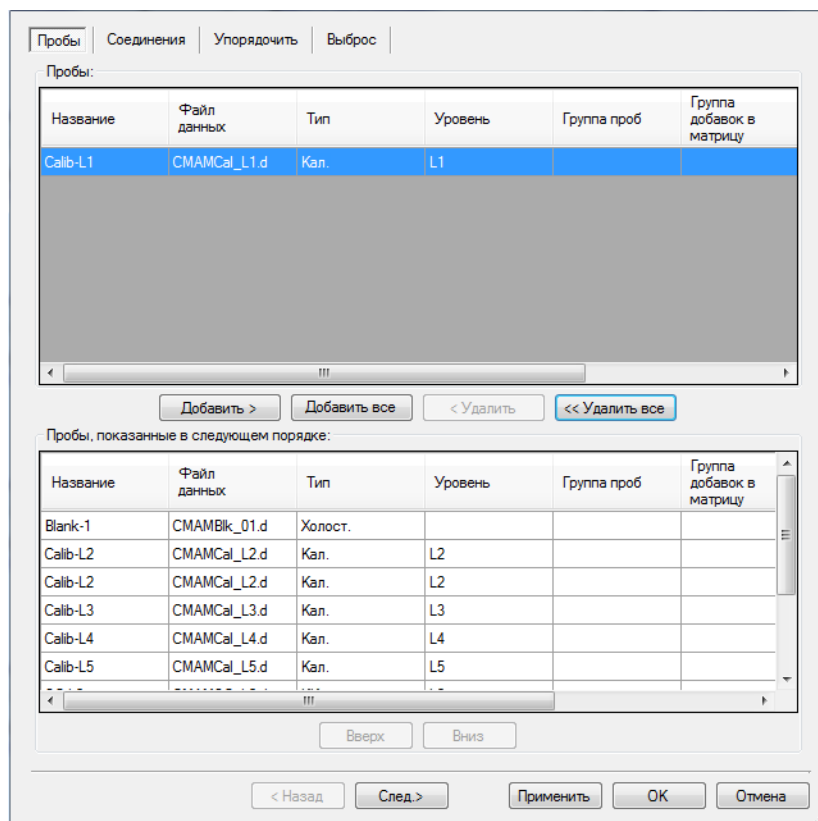
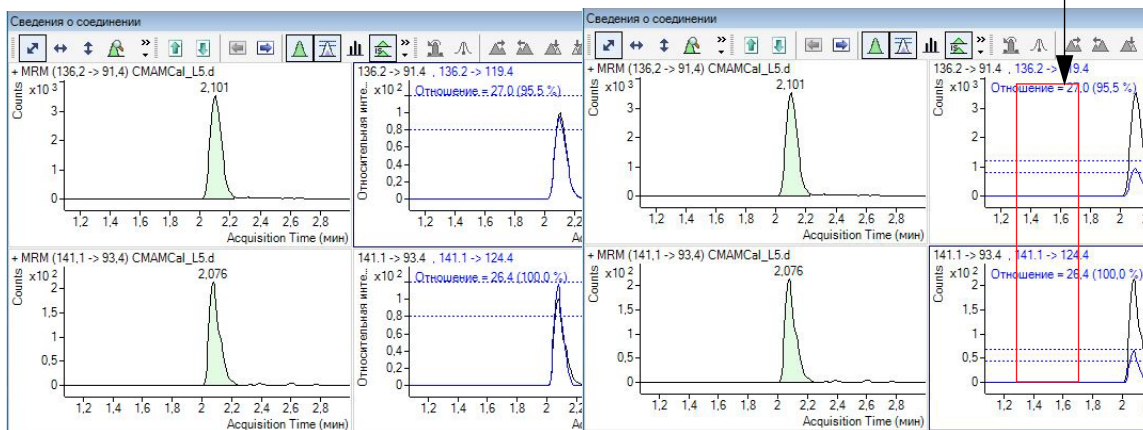


Рис. 16. Варианты отладки для Соединений навскидку

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.

Наложение иона-квантификатора и иона-квалификатора



Ион-квалификатор амфетамина – нормализованный

Ион-квалификатор амфетамина – ненормализованный

Рис. 17. Амфетамин в программе Quantitative Analysis

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

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

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).

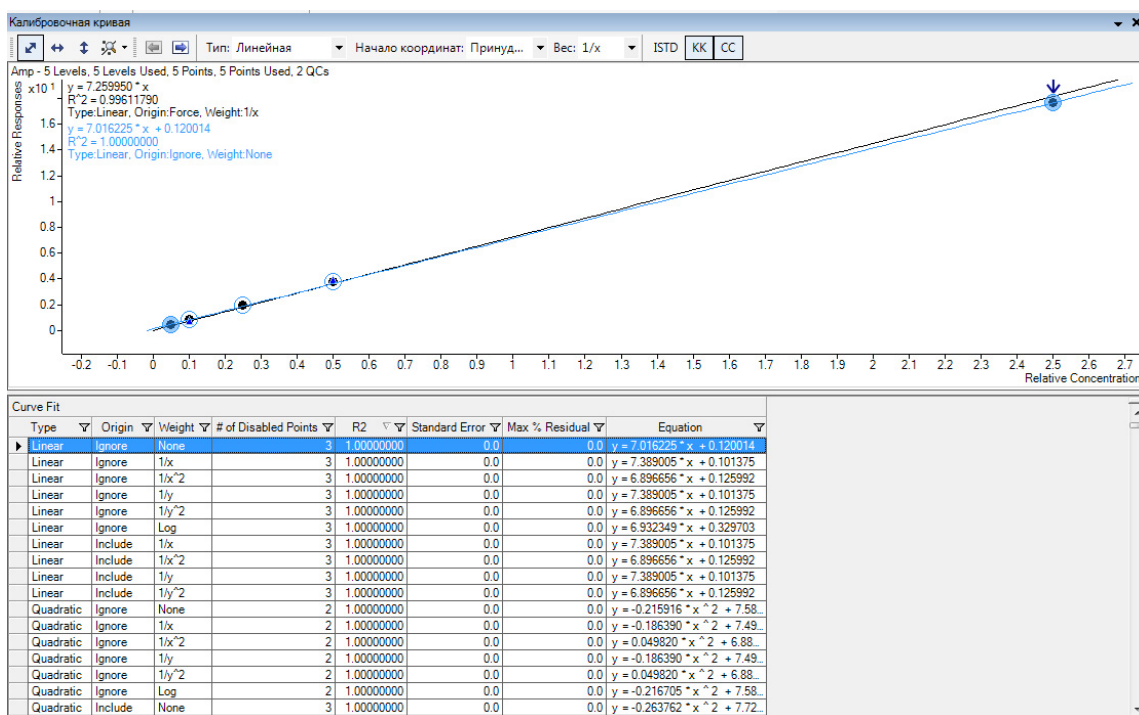


Рис. 18. Помощник аппроксимации кривой

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.

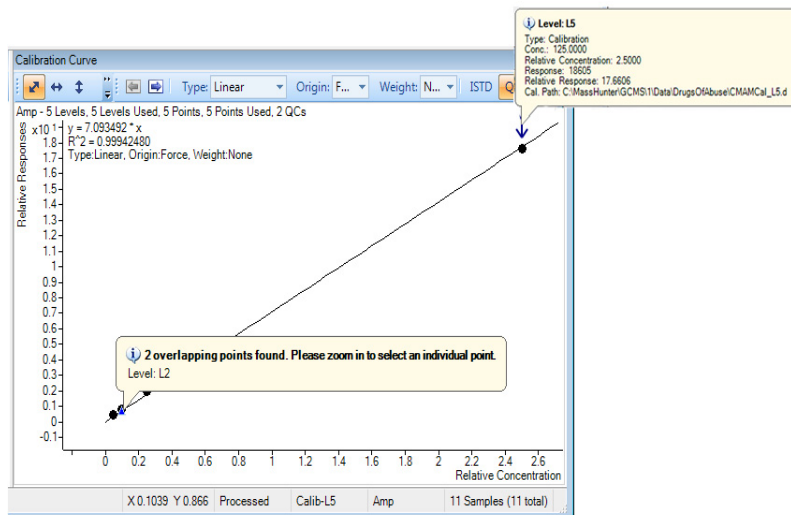


Рис. 19. Результаты по амфетамину: сведения о точках данных калибровки

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

© Agilent Technologies, Inc. 2021

Издание 1-е, ноябрь 2021 г.



G3336-98058

