

ПО Agilent MassHunter Workstation

Программа качественного анализа

Руководство по ознакомлению для ГХ/МС



Agilent Technologies

Примечания

© Agilent Technologies, Inc., 2014

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.

Каталожный номер руководства

G3336-98024

Издание

Редакция A, сентябрь 2014 г.

Напечатано в США

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

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

Версия ПО

Это руководство подходит для программы ПО Agilent MassHunter Workstation — программа качественного анализа версии B.07.00 и более поздних версий, пока не будет заменено.

Гарантия

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

Технологические лицензии

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

Ограничение прав

Ограничение прав Правительства США. Права на программное обеспечение и технические данные, предоставляемые федеральному правительству, включают только права, передаваемые в обычном порядке конечным пользователям. Компания Agilent предоставляет эту стандартную коммерческую лицензию на программное обеспечение и технические данные в соответствии с FAR 12.211 (технические данные) и 12.212 (программное обеспечение для компьютеров), а для министерства обороны — согласно DFARS 252.227-7015 (технические данные — коммерческие элементы) и DFARS 227.7202-3 (права на коммерческое программное обеспечение для компьютеров или документацию на такое программное обеспечение).

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.

ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ!

Сообщение ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ указывает на опасность. Это сообщение привлекает внимание к процедурам и приемам работы, несоблюдение или неправильное выполнение которых может привести к серьезным травмам или представлять угрозу для жизни. Если в документе встречается сообщение ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью уяснены и выполнены.

В этом руководстве...

Руководство содержит информацию для обучения по использованию ПО Agilent MassHunter Workstation — программы качественного анализа с данными ГХ/МС.

Прежде чем приступить к упражнениям, прочтите инструкции, изложенные в разделе «Перед выполнением упражнений...» на стр. 6.

Упражнение 1 Знакомство с основами качественного анализа

В процессе выполнения этого упражнения пользователь ознакомится с некоторыми из многих мощных возможностей программы качественного анализа. Выполнение этих заданий имеет большое значение независимо от того, какой тип данных используется.

Упражнение 2 Поиск и определение

В процессе выполнения этих заданий будут осуществляться поиск и определение соединений в файлах данных ГХ/МС.

Упражнение 3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать

В этих заданиях вы научитесь настраивать и выполнять метод качественного анализа. Затем вы выполните операции в рамках автоматизированного метода при открытии файла данных. Для выполнения каждого задания используется отдельный рабочий процесс.

Справка

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

Новые возможности

версии B.07.00

- Поддерживается интегратор Agile 2.
- Библиотека спектров поддерживает несколько типов ионов на одно соединение. Информация о типах из PCDL используется в алгоритмах Find by Formula (Найти по формуле) с подтверждением фрагмента, Find Compounds by MFE (Поиск соединений по MFE, Find by Auto MS/MS (Поиск по автоматической МС-МС) и Find by Targeted MS/MS (Поиск по целевой МС-МС).
- Улучшены примечания к фрагменту MFG по ЭУ.
- Подтверждение фрагмента поддерживает данные ГХ/Q-TOF ЭУ.
- Алгоритм Find Compounds by Molecular Feature (Поиск соединений по молекулярным особенностям) теперь поддерживает данные для всех ионов МС-МС.
- Очищенный спектр HighE, содержащий квалифицированные ионы, создается с помощью алгоритма Fragment Confirmation (Подтверждение фрагмента).
- В подтверждении фрагмента в алгоритме поиска по формуле вариантами источника фрагментных ионов являются либо только библиотека спектров, либо средний спектр фрагмента, помимо библиотеки спектров.
- Подтверждение фрагмента возможно без присутствия молекулярного иона.
- Столбец **Score (Frag) (Степень (фраг))** доступен в таблице соединений.
- Столбец **Source (Источник)** доступен в таблице соединений.
- Пользовательский интерфейс Library Search (Поиск по библиотеке) был существенно упрощен и может настраиваться в зависимости от потребностей пользователя для конкретных рабочих процессов ВЭЖХ или ГХ.

- Поиск в библиотеке по цепочке поддерживается и для библиотеки единичной массы, и для библиотеки точно измеренных масс.
- Можно выполнять поиск данных по точно измеренным массам по библиотеке единичной массы и по библиотеке точно измеренных масс одновременно.
- Поисковый алгоритм библиотеки имеет дополнительные правила для вычисления обратных степеней (для избежания невоспроизводимых результатов).
- Можно открыть файл данных браузера IM-MS.
- Можно импортировать спектры и хроматограммы из браузера IM-MS.
- Можно легко отправить спектр МС-МС или спектр фрагментов (ГХ ЭУ) из качественного анализа в библиотеку спектров.
- Теперь могут отображаться хроматограммы со следующих устройств: Компактный ДМД ВЭЖХ 1220, ДМД высокого динамического диапазона, компактный детектор с переменной длиной волны ВЭЖХ и компактный детектор с переменной длиной волны ВЭЖХ 1220.
- Можно автоматически запускать программу количественного анализа MassHunter и создавать метод количественной обработки из программы качественного анализа.

в пакете обновления 1 версии B.06.00

- Поддерживаются Excel 2013 и Excel 2010.
- Добавлена библиотека PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb.
- Добавлены файлы данных для всех ионов МС-МС (AIM_3CE(0-20-40). Также добавлен новый образец метода.

Перед выполнением упражнений...

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

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

ЗАМЕЧАНИЯ

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

Содержание

Упражнение 1 Знакомство с основами качественного анализа 9

Задание 1. Откройте программу качественного анализа 10

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС 13

Задание 3. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы 19

Задание 4. Закрепление хроматограммы 21

Задание 5. Изменение компоновок окон 23

Задание 6. Извлечение хроматограмм 25

Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС 27

Задание 8. Расчет значений пригодности системы 33

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы 37

Задание 10. Добавление примечаний 50

Задание 11. Добавление измерителя для массы 55

Упражнение 2 Поиск и определение 59

Задание 12. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы 60

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library) 65

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM) 70

Задание 15. Найдите соединения по интегрированию 74

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента 78

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке 91

Задание 18. Сохраните результаты 98

Упражнение 3 Использование рабочих процессов, экспорт и печать 103

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса 104

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF 111

Задание 21. Экспортируйте файл CEF 116

Задание 22. Печать отчета об анализе 118

Задание 23. Печать отчета по соединениям 123

Справка 127

Navigator View (Представление навигатора) и Compound Details View (Представление сведений о соединениях) 128

Работа с окнами 129

Работа с результатами в Data Navigator (Навигатор по данным) 132

Выполнение операций на хроматограмме 133

Выполнение операций на спектрах МС или МС-МС 135

Работа с визуальными хроматографическими данными 136

Работа с визуальными спектральными данными 139

Рабочие процессы 141

Настройка шаблона отчета 146

Упражнение 1
Знакомство с основами качественного анализа

Задание 1. Откройте программу качественного анализа 10
Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС 13
Задание 3. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы 19
Задание 4. Закрепление хроматограммы 21
Задание 5. Изменение компоновок окон 23
Задание 6. Извлечение хроматограмм 25
Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС 27
Задание 8. Расчет значений пригодности системы 33
Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы 37
Задание 10. Добавление примечаний 50
Задание 11. Добавление измерителя для массы 55

В этом упражнении вы познакомитесь с некоторыми из многих мощных возможностей программы качественного анализа для работы с данными ГХ/Q-TOF и ГХ/QQQ.

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

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

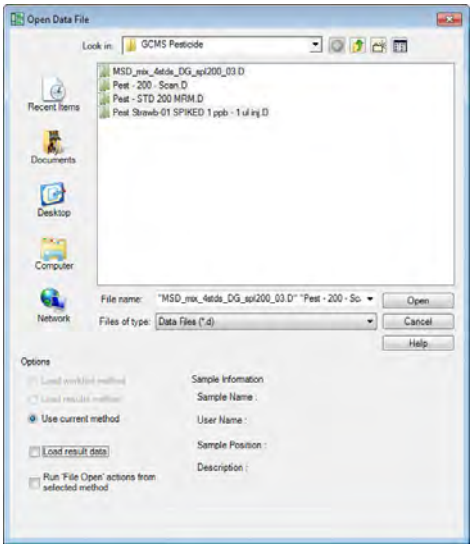
Задание 1. Откройте программу качественного анализа

В этом задании вы откроете несколько файлов данных с помощью текущего метода.

Задание 1. Откройте программу качественного анализа с несколькими файлами данных

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте программу качественного анализа. • Откройте файлы данных **Pest - 200 - Scan.d**, **Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d** и **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке **\\MassHunter\Data** или в папке, куда вы их скопировали.	**a** Дважды щелкните значок **Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.07.00**  . Система отобразит диалоговое окно Open Data Files (Открытие файлов данных). **b** Перейдите к папке **\\MassHunter\Data\GCMS Pesticide** или к папке, где находятся файлы примеров.	• Файл Pest - 200 - Scan.d содержит данные МС, а файлы Pest - STD 200 MRM.d и Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d содержат данные МС и данные МС/МС (все ГХ/QQQ). Файл MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d содержит данные ГХ/Q-TOF. • Справку можно вызвать для большинства вкладок и окон, в т. ч. диалоговых, нажав клавишу F1, когда данное окно активно. • Щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных),** если файлы находятся в разных папках.

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

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
• Убедитесь, что кнопка **Use current method (Использовать текущий метод)** нажата. • Убедитесь, что пункт **Load result data (Загрузить результаты)** не отмечен или затенен. Если пункт **Load result data (Загрузить результаты)** недоступен, это значит, что результаты не были сохранены в файле данных. Научиться сохранять результаты вы сможете в «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98. • Убедитесь, что пункт **Run 'File Open' actions from selected method (Выполнить действия при открытии файла из выбранного метода)** не отмечен.	 **Рис. 1** Открытие файлов данных при открытии программного обеспечения	
	c Нажмите и удерживайте клавишу **Shift** при выборе файлов **Pest - 200 - Scan.d**, **Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d** и **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d**. **d** Выберите команду **Open (Открыть)**. Все четыре файла данных отобразятся в окне навигатора по данным (Data Navigator), и от 1 до 3 хроматограмм отобразятся в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). **e** Щелкните значок **List Mode (Режим списка)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).	• Нажав клавишу **Ctrl**, можно выбрать файлы, которые не расположены подряд в списке. • То, что отобразится в главном окне на этом этапе, зависит от метода, компоновки окон, настроек отображения и содержания, которые использовались до того, как вы открыли эти файлы. • Если щелкнуть значок List Mode (Режим списка), его фон изменится на оранжевый.

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

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

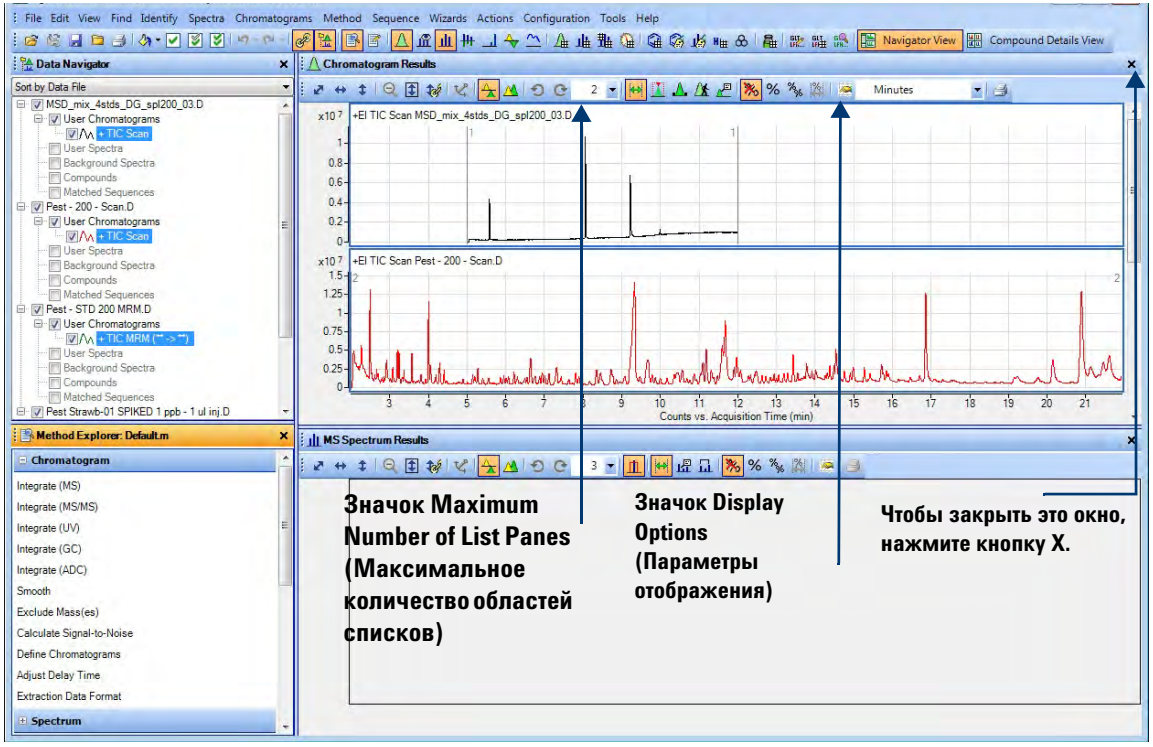


Рис. 2 Основное окно качественного анализа с загруженным общим рабочим процессом

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС

В этом задании вы научитесь переключаться между общим рабочим процессом (для пользователей ГХ/QQQ) и рабочим процессом скрининга соединений ГХ/Q-TOF (для пользователей ГХ/Q-TOF). Анализ данных ГХ/МС поддерживается только этими двумя рабочими процессами. Затем откройте диалоговое окно **User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)** и отметьте соответствующие пункты для системы ГХ/QQQ или системы ГХ/Q-TOF.

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 При необходимости откройте программу качественного анализа.	**a** Дважды щелкните значок **Agilent MassHunter Qualitative Analysis (Качественный анализ Agilent MassHunter)**  . Система отобразит диалоговое окно Open Data Files (Открытие файлов данных). **b** Нажмите кнопку **Cancel (Отмена)** в диалоговом окне Open Data Files (Открытие файлов данных).	• Справку можно вызвать для любой вкладки или окна, в т. ч. диалогового, нажав клавишу F1, когда данное окно активно.

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Переключитесь на общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).	**a** Если используется прибор ГХ/QQQ, выберите пункты **Configuration (Настройка) > Configure for Workflow (Настроить рабочий процесс) > General (Общие)**. Если используется прибор ГХ/Q-TOF, выберите пункты **Configuration (Настройка) > Configure for Workflow (Настроить рабочий процесс) > GC/Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХ/Q-TOF)**. **b** Нажмите кнопку **Load workflow's default method (Загрузить метод рабочего процесса по умолчанию)** и кнопку **Load workflow's default layout (Загрузить компоновку для рабочего процесса по умолчанию)**. **c** Нажмите кнопку **OK**. **d** Щелкните значок **List Mode (Режим списка)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).	• Если программа сбора данных (Data Acquisition) для ГХ/QQQ или ГХ/Q-TOF установлена на этом же компьютере, программное обеспечение настроит интерфейс пользователя автоматически. Раздел скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening) может уже быть доступен в окне обозревателя методов (Method Explorer). • По умолчанию хроматограммы накладываются друг на друга. В данным примерах хроматограммы показаны в **List Mode (Режиме списка)**.

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 В случае ГХ/QQQ настройте интерфейс пользователя так, чтобы отображались только функции для ГХ/QQQ.	**a** Выберите пункты **Configuration (Настройка) > User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)**. **b** Среди типов разделения (Separation types) отметьте только пункт **GC (ГХ)**. **c** Если используется прибор ГХ-QQQ, для типа ионизации (Ionization type) отметьте пункт **EI or other "hard" ionization technique (ЭУ или другой метод «жесткой ионизации»)** и отмените выделение пункта **CI, APCI, ESI, MADLDI or other "soft" ionization technique (CI, APCI, ESI, MADLDI или другой метод «мягкой ионизации»)**. **d** В разделе точности определения массы (Mass accuracy) отмените выделение пункта **Accurate mass (TOF, Q-TOF) (Точная масса (TOF, Q-TOF))**. Отметьте пункт **Unit mass (Q, QQQ) (Масса единицы (Q, QQQ))**. **e** В разделе Optional software features (Дополнительные свойства программного обеспечения) отмените выделение пунктов **Peptide Sequence Editor (Редактор последовательности пептидов)** и **BioConfirm Software (Программное обеспечение BioConfirm)**. **f** В разделе Non-MS detectors (Не детекторы МС) отмените выделение пунктов **UV** и **ADC**. **g** Отметьте пункт **Show advanced parameters (Показать дополнительные параметры)**. **h** Нажмите кнопку **OK**.	• Настроить доступность команд можно в диалоговом окне **User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)**. • Если эта возможность недоступна, скорее всего, она была скрыта при отмене выделения пункта в диалоговом окне User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя).

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

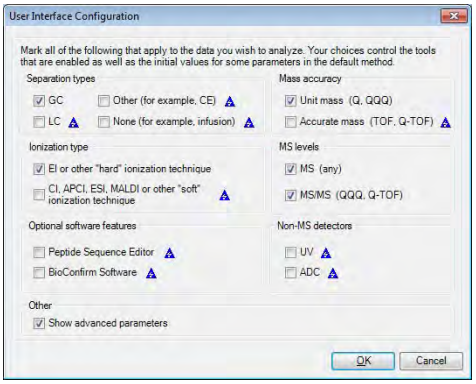


Рис. 3 Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/QQQ

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
4 Если используется инструмент ГХ/Q-TOF, настройте интерфейс пользователя так, чтобы отображались только функции для ГХ/Q-TOF.	**a** Выберите пункты **Configuration (Настройка) > User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)**. **b** Среди типов разделения (Separation types) отметьте только пункт **GC (ГХ)**. **c** В разделе типов ионизации (Ionization type) отметьте оба пункта. **d** В разделе уровней МС (MS levels) отметьте оба пункта. **e** В разделе точности определения массы (Mass accuracy) отметьте пункт **Accurate mass (TOF, Q-TOF) (Точная масса (TOF, Q-TOF))**. Отмените выделение пункта **Unit mass (Q, QQQ) (Единичная масса (Q, QQQ))**. **f** В разделе Optional software features (Дополнительные свойства программного обеспечения) отмените выделение пунктов **Peptide Sequence Editor (Редактор последовательности пептидов)** и **BioConfirm Software (Программное обеспечение BioConfirm)**. **g** В разделе Non-MS detectors (Не детекторы МС) отмените выделение пунктов **UV** и **ADC**. **h** Отметьте пункт **Show advanced parameters (Показать дополнительные параметры)**. **i** Нажмите кнопку **OK**.	• Настроить доступность команд можно в диалоговом окне **User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)**. • Если эта возможность недоступна, скорее всего, она была скрыта при отмене выделения пункта в диалоговом окне User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя).

Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для ГХ

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

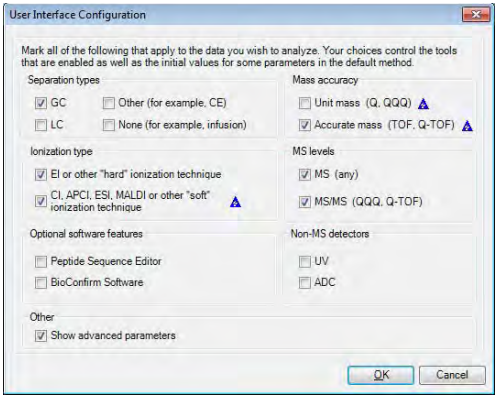


Рис. 4 Настройка интерфейса пользователя для ГХ/Q-TOF

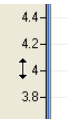
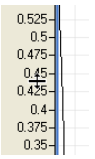
Задание 3. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы

В этом задании вы ознакомитесь с функциями увеличения и уменьшения масштаба в программе качественного анализа.

Задание 3. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Попробуйте увеличить и уменьшить масштаб только одной из трех хроматограмм (по осям X и Y). • Скройте все остальные. • Дважды увеличьте масштаб последнего пика. • Увеличьте масштаб еще раз при автоматическом масштабировании оси Y. • Уменьшите масштаб до предыдущего состояния. • Максимально уменьшите масштаб до исходного состояния хроматограммы.	**a** В окне навигатора по данным (Data Navigator) снимите флажки рядом с теми хроматограммами, которые необходимо скрыть. **b** Щелкните правую кнопку мыши и проведите по области последнего пика. Убедитесь, что на этом шаге не выбран значок **Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба)** . **c** Повторите шаг b. **d** Щелкните значок **Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y)**  на панели инструментов. **e** Еще раз щелкните правую кнопку мыши и третий раз проведите по области последнего пика. Программа качественного анализа автоматически масштабирует ось Y до самого большого значения в диапазоне. **f** Нажмите на значок **Unzoom (Уменьшение масштаба)**  для отмены последней операции масштабирования. Можно произвести отмену последних пятнадцати операций масштабирования. **g** Нажмите на значок **Autoscale X-axis and Y-axis (Автоматическое масштабирование осей X и Y)**  для максимального уменьшения масштаба.	• Если строка не отмечена в окне навигатора по данным, то данная информация не отображается ни в каком другом окне программы качественного анализа. Необходимо просто поставить флажок рядом с данной информацией в окне навигатора по данным, и информация опять отобразится в других окнах. • Эти функции изменения масштаба можно также использовать для спектров в окне предварительного просмотра спектров (Spectrum Preview), в окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results) и окне разницы результатов (Difference Results). • Выбранный значок имеет оранжевый цвет фона.

Задание 3. Увеличение и уменьшение масштаба хроматограммы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Попробуйте увеличивать и уменьшать масштаб каждой оси по отдельности. • Увеличьте масштаб только по оси X. Подсказка. Правой кнопкой щелкните по значениям оси X и переместите курсор слева направо. • Частично уменьшите масштаб по оси X. Подсказка. Передвиньте курсор в противоположном направлении. • Максимально уменьшите масштаб по оси X. • Повторите предыдущие шаги для оси Y.	**a** Для увеличения масштаба по оси X перемещайте курсор к значениям оси X до появления двойной горизонтальной стрелки. **b** Щелкните правой кнопкой мыши и перетащите новый курсор слева направо через значения оси X. **c** Для уменьшения масштаба по оси X щелкните правую кнопку мыши и перетащите справа налево по значениям оси X. **d** Нажмите на значок **Autoscale X-axis (Автоматическое масштабирование по оси X)** для максимального уменьшения масштаба по оси X. **e** Для увеличения масштаба по оси Y перемещайте курсор к значениям оси Y до появления двойной вертикальной стрелки. **f** Щелкните правой кнопкой мыши и перетащите новый курсор снизу вверх через значения оси Y. **g** Для уменьшения масштаба по оси Y щелкните правую кнопку мыши и перетащите сверху вниз по значениям оси Y. **h** Нажмите на значок **Autoscale Y-axis (Автоматическое масштабирование по оси Y)** для максимального уменьшения масштаба по оси X.	 **Двойная горизонтальная стрелка**  **Новый курсор появляется при щелчке правой кнопкой мыши по значениям оси X.**  **Двойная вертикальная стрелка**  **Новый курсор появляется при щелчке правой кнопкой мыши по значениям оси Y.**

Задание 4. Закрепление хроматограммы

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

Задание 4. Закрепление хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
• Закрепите хроматограмму. ◦ Выведите на экран все хроматограммы. ◦ Убедитесь, что для списка просмотра хроматограмм установлено значение 1. ◦ В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) выберите вторую хроматограмму полного ионного тока (TIC). ◦ Закрепите эту хроматограмму полного ионного тока (TIC). ◦ Прокрутите список хроматограмм. ◦ Отмените закрепление.	**a** В навигаторе по данным (Data Navigator) отметьте хроматограммы, которые вы скрыли в предыдущем задании. **b** Убедитесь, что для максимального количества панелей в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) установлено значение 1. **c** В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) выберите вторую хроматограмму полного ионного тока (TIC). **d** Щелкните правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выберите команду **Set Anchor (Закрепить).** **e** Используйте полосу прокрутки в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), чтобы просматривать хроматограммы в списке. Вторая хроматограмма полного ионного тока (TIC) остается видимой как первая хроматограмма. **f** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Anchor (Отменить закрепление).**	• Если хроматограмма закреплена, в окне навигатора по данным (Data Navigator) рядом с названием закрепленной хроматограммы появляется значок закрепления. • После того как была закреплена одна хроматограмма, в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) могут появиться две, даже если для списка отображения установлено значение 1. Это означает, что вы просматриваете еще одну хроматограмму помимо закрепленной. • Можно щелкнуть правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выбрать команду **Clear Anchor (Отменить закрепление)** в контекстном меню.

Задание 4. Закрепление хроматограммы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

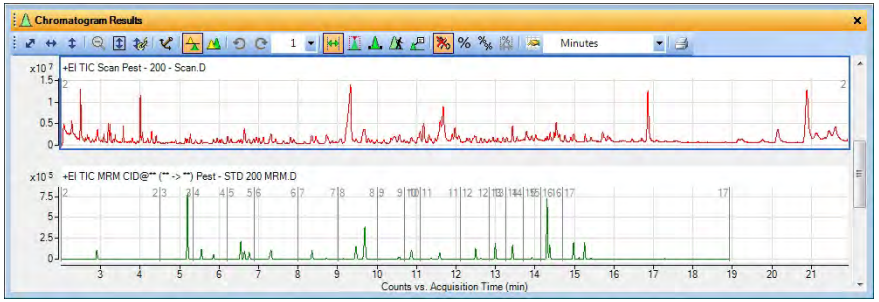


Рис. 5 Закрепленная хроматограмма (TIC) в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

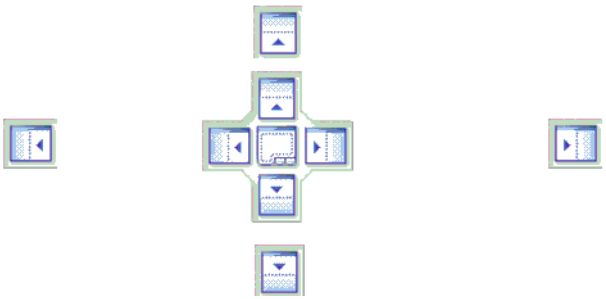
Задание 5. Изменение компоновок окон

В этом задании вы научитесь перемещать окна в основном представлении и создавать различные компоновки окон.

Задание 5. Изменение компоновки окон

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Измените компоновку окон: • Измените размер окна. • Сохраните компоновку окон. • Разблокируйте компоновку. • Измените параметры окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), чтобы сделать его плавающим. • Переместите окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). • Выведите на экран инструменты для изменения положения окон.	• Чтобы изменить размер окна, перетащите границу между окнами. • Чтобы сохранить компоновку окон, выберите пункты **Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) Save Layout (Сохранить компоновку)**. • Чтобы разблокировать компоновку, выберите пункты **Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Lock Layout (Блокировка компоновки)**. • Чтобы сделать окно плавающим, щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна и в контекстном меню выберите пункт **Floating (Плавающее)**. • Чтобы переместить окно, щелкните в области заголовка окна и перетащите окно на необходимое место. • Чтобы отобразить инструменты для изменения положения, перетащите окно и разместите его поверх другого окна. Когда одно окно перекроет другое, программа отобразит несколько инструментов компоновки (см. Рис. 6).	• Если компоновка разблокирована, система не отображает знак выделения возле пункта меню Lock Layout (Блокировка компоновки). • Пользоваться инструментами для изменения положения окон можно только при разблокированной компоновке. • Также, окно можно сделать плавающим, дважды щелкнув в области заголовка окна. • Программное обеспечение содержит много различных готовых компоновок. Кроме того, компоновки можно загружать. • Программное обеспечение содержит несколько различных рабочих процессов. С каждым рабочим процессом загружается отдельная компоновка. При переключении на другой рабочий процесс меняется и компоновка.

Задание 5. Изменение компоновки окон (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		
	Рис. 6 Инструменты для изменения положения окон	
2 Измените положение окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). • Переместите окно так, чтобы оно оказалось вверху, слева, справа и затем внизу по отношению к другим окнам. • Переместите два окна так, чтобы они оказались одно над другим и были доступны только с помощью вкладок внизу. • Восстановите компоновку по умолчанию.	• Если вы наведете курсор на один из более мелких значков, окно, которое вы перетаскиваете, окажется сверху, справа, снизу или слева от всех других окон. • Наведите курсор на более крупный значок. Кроме того, окно можно поместить сверху, справа, снизу или слева от другого окна, переместив курсор через края большего значка. • Чтобы открыть два окна вместе перетащите курсор в центр большего значка. Отобразится затененная версия двух окон, открытых вместе. Отпустите кнопку мыши. Два окна откроются вместе. • Выберите пункты **Configuration (Настройка) > Window Layouts (Компоновка окон) > Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию)**.	• Чтобы положение изменилось, курсор должен находиться на одной из стрелок в поле. • Если выбрать команду **Restore Default Layout (Восстановить компоновку по умолчанию)**, восстановится компоновка, которая используется с общим рабочим процессом и рабочим процессом скрининга соединений ГХ/Q-TOF. Если используется другой рабочий процесс, необходимо загрузить соответствующую компоновку.

Задание 6. Извлечение хроматограмм

В этом задании вы извлечете и объедините хроматограммы из исходной хроматограммы полного ионного тока (TIC).

Задание 6. Извлечение хроматограмм

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Извлеките ионные хроматограммы (EIC) из двух масс в файле данных **Pest - 200 - Scan.d** и объедините их. • Значения m/z равны 129,0 и 414,2. • Не объединяйте пики из отдельных масс в одну хроматограмму.	**a** В окне навигатора по данным (Data Navigator) отмените выделение всех файлов данных, кроме **Pest - 200 - Scan.d**. **b** Откройте диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм) с помощью параметра ниже или одного из параметров справа: • Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)**. **c** В списке **List of opened data files** (Список открытых файлов данных) выберите **Pest - 200 - Scan.d.** **d** В окне списка **Type** (Тип) выберите **EIC**. **e** В поле **m/z value(s)** (значения m/z) введите `129.0, 414.2` **f** При необходимости отмените выделение пункта **Merge multiple masses into one chromatogram (Объединить несколько масс в одну хроматограмму)**, предназначенного для объединения ионных хроматограмм (EIC). **g** Нажмите кнопку **OK**. **h** В панели инструментов окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) установите для параметра **Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка)** значение 3.	• Также, хроматограммы можно извлекать одним из следующих способов. • Щелкните правой кнопкой мыши в области хроматограммы и выберите пункт **Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)**. • В навигаторе по данным (Data Navigator) выделите пункт **TIC Scan (TIC сканирования)** для **Pest - 200 - Scan.d**; затем щелкните правой кнопкой мыши команду **TIC Scan (TIC сканирования)** и выберите пункт **Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)**. • Можно использовать уровень MC **All (Все)** или **MS (MC)**. • Обратите внимание, что можно выбрать автоматическое интегрирование хроматограммы после извлечения. • Можно также извлечь хроматограмму из масс-спектра.

Задание 6. Извлечение хроматограмм (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

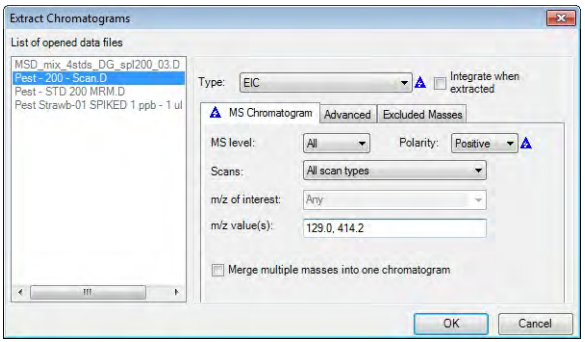


Рис. 7 Диалоговое окно Extract Chromatograms (Извлечение хроматограмм)

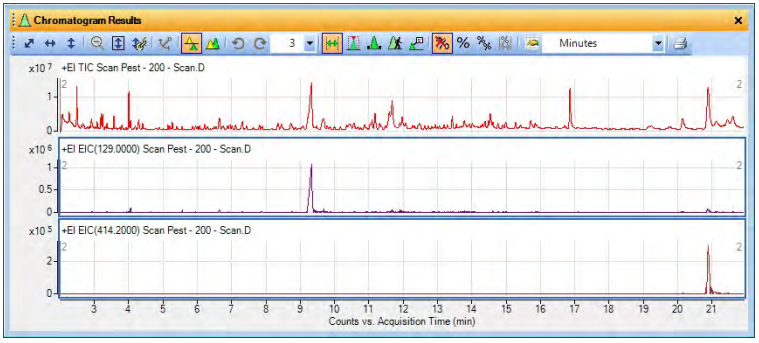


Рис. 8 Объединенные извлеченные ионные хроматограммы (EIC) в сравнении с исходной хроматограммой (TIC)

Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы ГХ/МС

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

Задание 7. Интерактивное интегрирование хроматограммы (ГХ/МС)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Интегрируйте **сканированную хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных Pest - 200 - Scan.d** с помощью любой из опций, указанных справа.	**a** Отметьте файл данных Mark the Pest - 200 - Scan.D в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Выделите сканированную хроматограмму полного ионного тока (TIC) и используйте одну из приведенных ниже команд. • В контекстном меню выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**. • Щелкните правой кнопкой мыши в любом месте в окне хроматограммы и выберите пункт **Integrate Chromatogram** (Интегрировать хроматограмму). • В окне навигатора по данным (Data Navigator) выберите пункты **Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms (Хроматограммы пользователя) TIC Scan (TIC сканирования),** затем правой кнопкой мыши щелкните пункт **TIC Scan (TIC сканирования)** и выберите команду **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**.	• Обратите внимание, что программа интегрирует практически все пики в хроматограмме. • В окне редактора методов (Method Editor) следует выбрать необходимый интегратор для данных МС, данных МС/МС и данных ГХ. • В данный момент используется хроматограмма МС, поэтому при ее интегрировании применяются значения, установленные в разделе Integrate (MS) (Интегрировать (МС)) редактора методов (Method Editor).

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

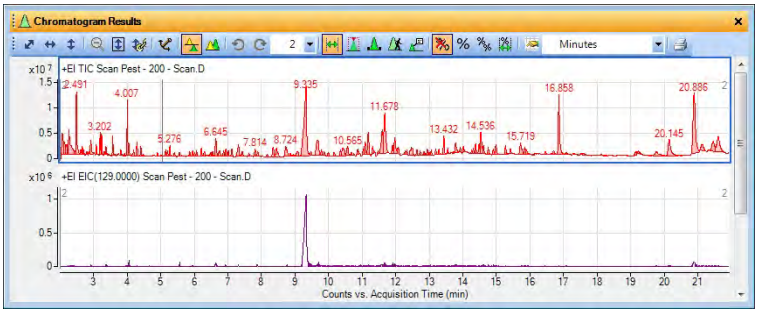
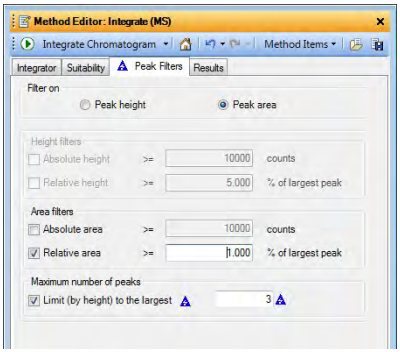
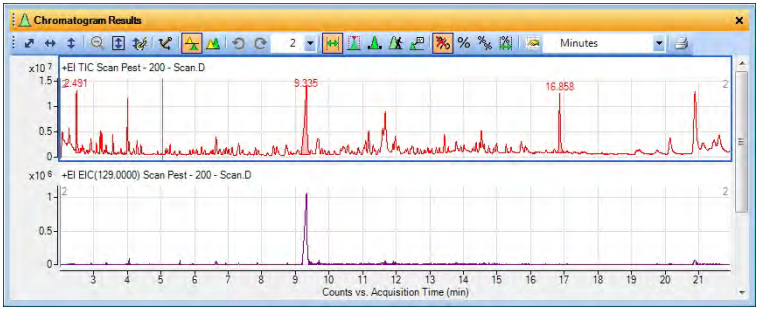
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Отобразите только две хроматограммы одновременно.	• Выберите значение **2** в поле **Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).	
		**Интегрируется множество маленьких пиков.**

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

3 Измените порог, чтобы интегрировать меньше пиков. • Измените порог, чтобы сохранить только три наибольших пика.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите пункты **Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (MC)**, после чего отобразится вкладка Integrate (MS) (Интегрировать (MC). **b** Выберите интегратор **Agile 2**. **c** Перейдите на вкладку **Peak Filters (Фильтры пиков)**. **d** В разделе Maximum number of peaks (Максимальное количество пиков) отметьте пункт **Limit (by height) to the largest (Только наибольшие (по высоте))** и введите значение 3.	• При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают.

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

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		
	Рис. 10 Вкладка Peak Filters (Фильтры пиков) с отмеченным параметром **Limit (by height) to the largest (Только наибольшие (по высоте))**	
4 Повторное интегрирование хроматограммы	**e** Нажмите кнопку  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor), чтобы выполнить интегрирование с новым параметром.	• Обратите внимание, что теперь интегрируются только три наиболее высоких пика.
		
	Рис. 11 Интегрированная сканированная хроматограмма (TIC) с ограниченным количеством пиков	

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

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Интегрируйте хроматограмму TIC MRM для файла данных **Pest - STD 200 MRM.D**.	**a** В окне навигатора по данным (Data Navigator) выберите **TIC MRM** для файла данных Pest - STD 200 MRM.d. **b** Используйте одну из приведенных далее команд, чтобы интегрировать хроматограммы. • В контекстном меню выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**. • Щелкните правой кнопкой мыши в любом месте в окне хроматограммы и выберите пункт **Integrate Chromatogram** (Интегрировать хроматограмму). • В окне навигатора по данным (Data Navigator) щелкните правой кнопкой мыши выделенную хроматограмму и выберите пункт **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**. **c** Установите увеличенный масштаб от 5,8 до 8,5 минут. **d** Установите для параметра **Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка)** значение 2.	• Нажмите клавишу **Ctrl**, чтобы выделить более одной хроматограммы в окне навигатора по данным (Data Navigator). • Обратите внимание, что программа интегрирует практически все пики в хроматограмме. • В данный момент используются хроматограммы MC/MC, поэтому при интегрировании этой хроматограммы используются значения, установленные в разделе Integrate (MS/MS) (Интегрировать (MC/MC)) редактора методов (Method Editor).. Можно выбрать один интегратор для интегрирования хроматограмм MC и другой интегратор для интегрирования хроматограмм MC/MC.

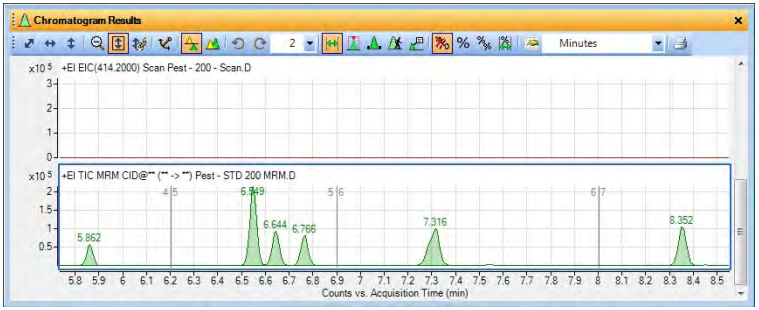
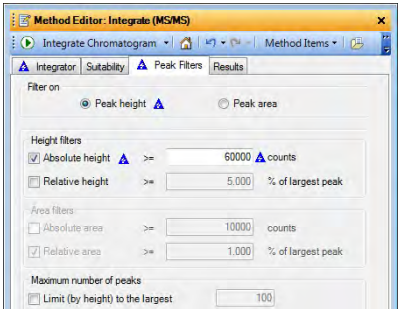


Рис. 12 Интегрированные хроматограммы MRM

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

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Выберите интегратор **MS/MS (GC) (МС-МС (ГХ))**. Измените фильтр так, чтобы перенести только пики с абсолютной высотой больше или равной 60000.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите пункты **Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (МС-МС)**. **b** В разделе **Integrator (Интегратор)** выберите **MS/MS (GC) (МС-МС (ГХ))**. **c** Перейдите на вкладку **Peak Filters (Фильтры пиков)**. **d** В разделе **Filter on (Параметр фильтра)** выберите пункт **Peak height (Высота пика)**. **e** В разделе фильтров высоты (Height filters) выделите пункт **Absolute height (Абсолютная высота)**. **f** Введите значение `60000` для параметра **Absolute height (Абсолютная высота)**.	• При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают.
	 **Рис. 13** Вкладка Peak Filters (Фильтры пиков) с отмеченным пунктом **Absolute height (Абсолютная высота)**	
7 Повторное интегрирование хроматограммы	**g** Щелкните кнопку  на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor).	• Обратите внимание, что теперь интегрируются только наибольшие пики.

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

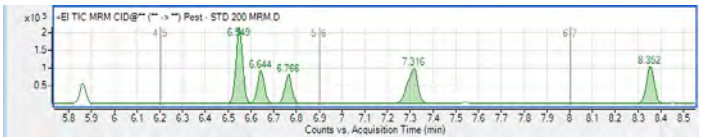
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		Меньший пик с временем 5,8 минут уже не включен в результаты интегрирования, потому что абсолютная высота этого пика ниже 60000 единиц.

Рис. 14 Интегрированные хроматограммы TIC и EIC MC/MC с более высокими значениями порогов

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

Задание 8. Расчет значений пригодности системы

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

Задание 8. Интерактивное интегрирование хроматограммы (MC)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Интегрируйте **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** и хроматограмму **Pest - 200 - Scan.d**, используя одну из опций, перечисленных справа.	**a** Установите отметку рядом с файлом данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Установите отметку рядом с файлом данных Pest - 200 - Scan.d в окне навигатора по данным (Data Navigator). **c** Выделите обе хроматограммы (TIC). **d** Интегрируйте хроматограммы **TIC Scan (Сканированная TIC)** для этих двух файлов, используя любой из перечисленных далее вариантов. • В главном меню выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**. • Выделите хроматограмму. Затем щелкните ее правой кнопкой мыши и выберите пункт **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**. • В окне навигатора по данным (Data Navigator) выделите пункт **TIC Scan (Сканированная TIC)** для обоих файлов данных. Затем щелкните правой кнопкой мыши любую из хроматограмм и выберите команду **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)**.	• Для общего рабочего процесса и для рабочего процесса ГХ/Q-TOF при интегрировании используется интегратор **Agile 2**, потому что он выбран в методе по умолчанию для данного рабочего процесса. • Это значение можно поменять, выбрав пункты Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (MC)) > вкладка Integrator (Интегратор). • Обратите внимание, что при интегрировании с параметрами по умолчанию определяются очень маленькие пики.

Задание 8. Интерактивное интегрирование хроматограммы (MC) (продолжение)

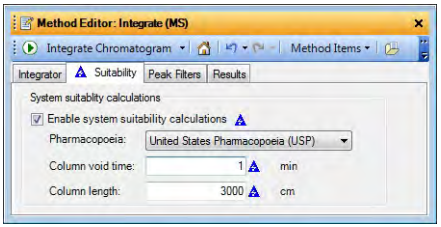
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии



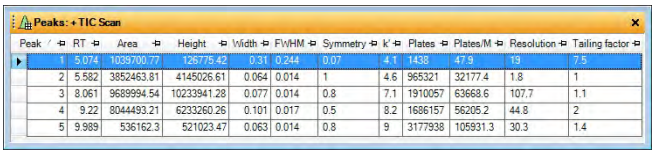
Рис. 15 Одно из контекстных меню в навигаторе по данным (Data Navigator) и интегрированные хроматограммы

2 Включите вычисления значений пригодности системы для хроматограмм MC.	**a** В обозревателе методов (Method Explorer) выберите пункты **Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (MC))**, после чего отобразится вкладка Integrator (Интегратор). **b** Выберите вкладку **Suitability (Пригодность)**. **c** Отметьте пункт **Enable system suitability calculations (Включить расчеты пригодности системы)**. **d** Выберите пункт **United States Pharmacopoeia (USP) (Фармакопея США)**. **e** В поле **Column void time (Мертвое время колонки)** введите значение `1`. **f** В поле **Column length (Длина колонки)** введите значение `3000`.	• При изменении значения, сохраненного в текущем методе, появляется голубой треугольник. После сохранения метода треугольники исчезают. • Алгоритмы, которые используются для установки нескольких колонок в списке пиков интегрирования (Integration Peak List), зависят от выбранной фармакопеи. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

Задание 8. Интерактивное интегрирование хроматограммы (MC) (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
	 **Рис. 16** Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS) (Интегрировать (MC)), вкладка Suitability (Пригодность)	**Фактическое время освобождения колонки и длина колонки для этих файлов данных отличаются от представленных значений. Эти значения используются только для данного примера.**
3 Повторное интегрирование хроматограммы.	• Щелкните значок **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)** на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor), чтобы выполнить интегрирование с новым параметром.	
4 Посмотрите расчеты пригодности системы. • Откройте окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List). • Просмотрите значения для области шума и рассчитайте соотношение «сигнал-шум» для интегрированных пиков.	**a** Выберите пункты **View (Просмотреть) > Integration Peak List (Список пиков интегрирования)**. **b** Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна Peaks (Пики) и выберите пункт **Floating (Плавающее)**. **c** Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка любого столбца, который не нужен, и выберите команду **Remove Column (Удалить столбец)**. **d** Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка любого столбца и выберите команду **Add/Remove Columns (Добавить/удалить столбцы)**, чтобы изменить видимые столбцы.	• Расчеты пригодности системы включены в таблицу списка пиков интегрирования (Integration Peak List). • Эти значения включают k', Tailing factor (Коэффициент размытия), Plates (Тарелки), Plates/M (Тарелки/м) и Symmetry (Симметрия). • Можно также включить расчеты пригодности системы для хроматограммы MC, MC/MC и ГХ.

Задание 8. Интерактивное интегрирование хроматограммы (MC) (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		
	Рис. 17 Таблица интегрированных пиков со значениями пригодности системы	
5 Восстановите значения для метода по умолчанию и закройте окно редактора методов (Method Editor) и окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List).	**a** Чтобы отменить внесенные изменения и восстановить значения из метода по умолчанию, щелкните значок **Restore to last saved values from file (Восстановить последние сохраненные значения из файла)** на панели инструментов в окне редактора методов (Method Editor). **b** Закройте окно редактора методов **(Method Editor)**. **c** Щелкните правой кнопкой мыши в области заголовка окна списка пиков интегрирования (Integration Peak List) и выберите пункт **Floating (Плавающее)**. **d** Выберите пункты **View (Просмотреть) > Integration Peak List (Список пиков интегрирования)**.	• Если еще раз выбрать команду Floating (Плавающее) в контекстном меню, окно списка пиков интегрирования (Integration Peak List) вернется на свое исходное место.

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

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

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Просмотрите хроматограмму и найдите исходный ион и дочерний ион для нескольких последних пиков в **Pest - STD 200 MRM.d**. • Приблизьте область между 13 и 16 минутами. • Используйте значок Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы). • Просмотрите спектры, начиная примерно с 13 минуты, перемещая стрелку вправо.	**a** Отметьте строку **Pest - STD 200 - MRM.D** в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Закройте окно редактора методов (Method Editor). **c** Закройте окно результатов спектра MC (MS Spectrum Results). **d** Выберите хроматограмму **TIC MRM** в окне навигатора по данным (Data Navigator). **e** Щелкните значок **Autoscale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). **f** Выберите значение **1** для параметра Maximum number of list panes (Максимальное количество областей списка). **g** Чтобы приблизить несколько пиков, щелкните правой кнопкой мыши над пиком на 13 минуте и протащите до 16 минуты, затем отпустите. **h** Щелкните значок **Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). **i** Разместите курсор просмотра хроматограммы над осью X примерно на 13 минуте и щелкните левой кнопкой мыши. **j** Чтобы перемещаться от спектра к спектру, используйте клавиши с правой и левой стрелкой на клавиатуре.	• Инструмент Walk Chromatogram (Просмотр хроматограммы) особенно полезен при работе с данными MC/MC для определения исходного и дочернего ионов. • Спектр для каждой точки, которую вы щелкаете в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results), автоматически отображается в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) (открывается автоматически). • Иногда в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) отображаются два спектра. Например, в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) показаны два спектра для каждой точки, которую вы щелкнули возле пика на уровне 13,431 минуты.

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

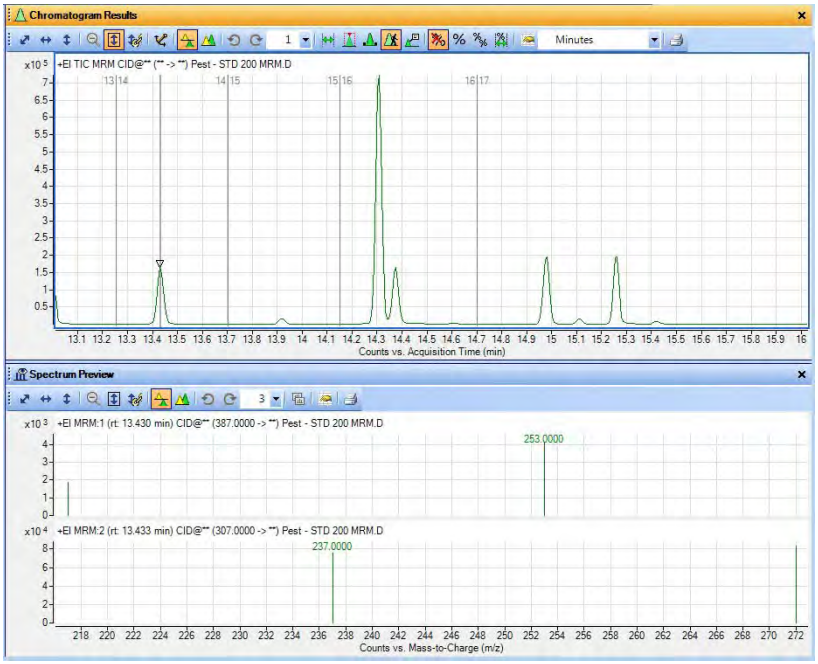


Рис. 18 Просмотр хроматограммы и двух спектров MRM для пика на уровне 13, 43 минуты

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

2 Извлеките спектры из указанных точек данных для пика на уровне 5,2 минуты и пика на уровне 14,3 минуты файла данных **Pest - STD 200 MRM.d**.
• Извлеките спектр из пика на или около уровня 5,2 мин. и затем из одной из точек минимума, используя любой из вариантов, описанных в разделе комментариев (Comments).
• Извлеките спектр из пика на или около уровня 14,3 минуты. (еще не точка минимума)
• Измените представление, чтобы отобразить минимум три спектра.
	a Щелкните значок **Range Select (Выбор диапазона)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).
	b Закройте окно просмотра спектров (Spectrum Preview).
	c Щелкните значок **Zoom Out (Уменьшить масштаб)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).
	d Чтобы увеличить масштаб пика на уровне 5,2 минуты, щелкните правой кнопкой мыши над пиком на уровне 4,0 мин. и протащите до 6,0 мин., затем отпустите.
	e Из области пика на уровне 5,2 мин. извлеките спектр любым из способов, описанных в колонке комментариев (Comments).
	f На точке минимума возле уровня 5,1 мин. извлеките спектр.
	g Щелкните значок **Zoom Out (Уменьшить масштаб)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).
	h Увеличьте масштаб области от 14 до 15 мин.
	i На пике возле уровня 14,3 минуты извлеките спектр любым из способов, описанных в колонке комментариев (Comments). (Не извлекайте пока спектр из точки минимума.)
	j Если необходимо, выберите значение 4 для параметра **Maximum number of list panes** (Максимальное количество областей списка) на панели инструментов в окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results).
		• Когда вы приближаете или отдаляете изображение, убедитесь, что параметр AutoScale Y-axis during Zoom (Автоматическое масштабирование оси Y) включен. Фон значка будет оранжевым, если параметр включен.
		• Извлечь спектр можно одним из следующих способов.
		  • Дважды щелкните точку данных в хроматограмме.
		  • Щелкните точку данных в хроматограмме, затем щелкните правой кнопкой мыши в любом месте хроматограммы. Выберите пункт **Extract MS Spectrum (Извлечь спектр MC)**. Появится диалоговое окно Extract Spectrum (Извлечение спектра). Убедитесь, что выбран файл **Pest - STD 200 MRM.d**, и выберите команду **Extract (Извлечь)** в диалоговом окне Extract Spectrum (Извлечение спектра).
		• Обратите внимание, что при первом извлечении спектра сам спектр появляется в окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results), а тип спектра и время удерживания появляются в разделе User Spectra (Спектр пользователя). Все последующие извлеченные спектры также появятся в обоих местах.
		• При извлечении спектра MC из пика возле уровня 14,3 минуты извлекаются два спектра, потому что на этом пике происходят два перехода.

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

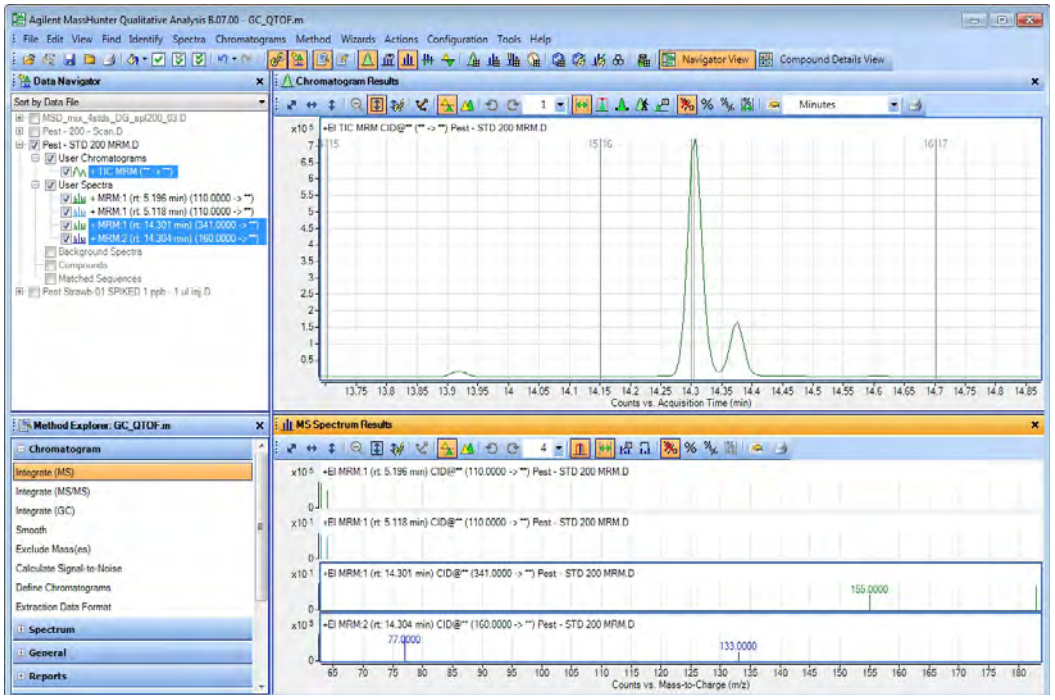


Рис. 19 Главное окно с двумя спектрами MRM из пика на уровне 5,2 мин и двумя спектрами MRM из пика на уровне 14,3 мин

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Извлеките спектр МС для точки минимума на уровне 14,35 мин. из файла данных **Pest - STD 200 MRM.d**. • Включите просмотр спектров (Spectrum Preview). • Извлеките спектр из точки минимума на уровне времени удержания (RT) 14,3 минуты. • Скопируйте этот спектр в папку User Spectra (Спектры пользователя). • Измените представление, чтобы отобразить 6 спектров. • Выключите просмотр спектров (Spectrum Preview).	**a** Щелкните значок **Spectrum Preview** (Просмотр спектров) . **b** На точке минимума возле уровня 14,3 минуты извлеките спектр. **c** Щелкните правой кнопкой мыши в окне просмотра спектров (Spectrum Preview) и выберите команду **Copy to User Spectra (Скопировать в спектры пользователя)**. Спектры будут скопированы в раздел спектров пользователя (User Spectra) в навигаторе по данным (Data Navigator) и показаны в окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results). **d** Щелкните стрелку вниз возле списка панелей спектров и выберите значение **6**. **e** Закройте окно просмотра спектров (Spectrum Preview).	• Когда включен просмотр спектров (Spectrum Preview), система показывает каждый выбранный вручную спектр в окне просмотра спектров (Spectrum Preview), но не в разделе спектров пользователя (User Spectra) навигатора по данным (Data Navigator). • При включенном просмотре спектров (Spectrum Preview) программа качественного анализа перезаписывает предыдущий спектр, когда извлекается новый спектр. • Режим просмотра спектров (Spectrum Preview) полезен, когда необходимо быстро просмотреть спектры в хроматограмме и сохранить только некоторые из них.

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии



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

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

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

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

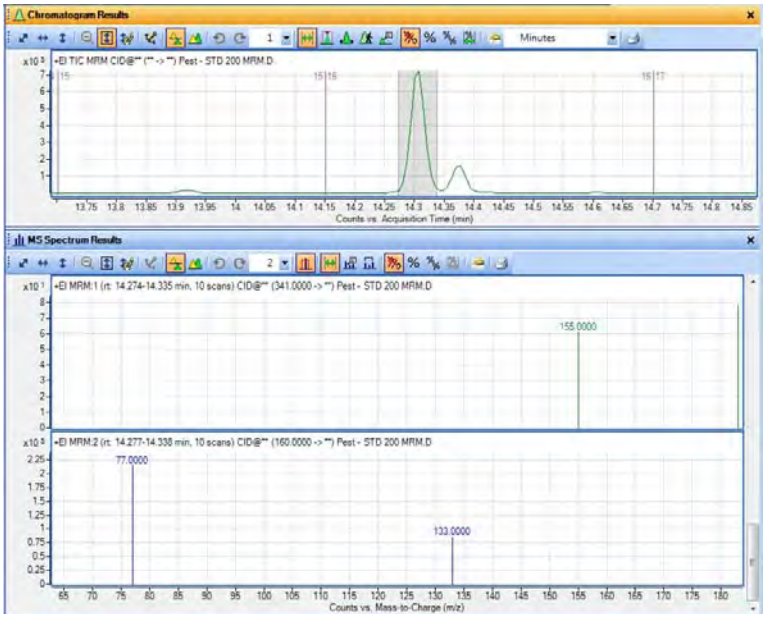


Рис. 21 Окна результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) и результатов спектра МС (MS Spectrum Results) с двумя усредненными спектрами

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

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

a Щелкните значок **Zoom Out (Уменьшить масштаб)** на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).

b Нажмите клавишу **Ctrl**.

c Щелкните в левой части пика на уровне 5,2 мин. и перетащите в правую часть пика, затем отпустите кнопку мыши.

d Отпустите клавишу **Ctrl**.

e Извлеките усредненные спектры с помощью следующего способа или любого их описанных справа.

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

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

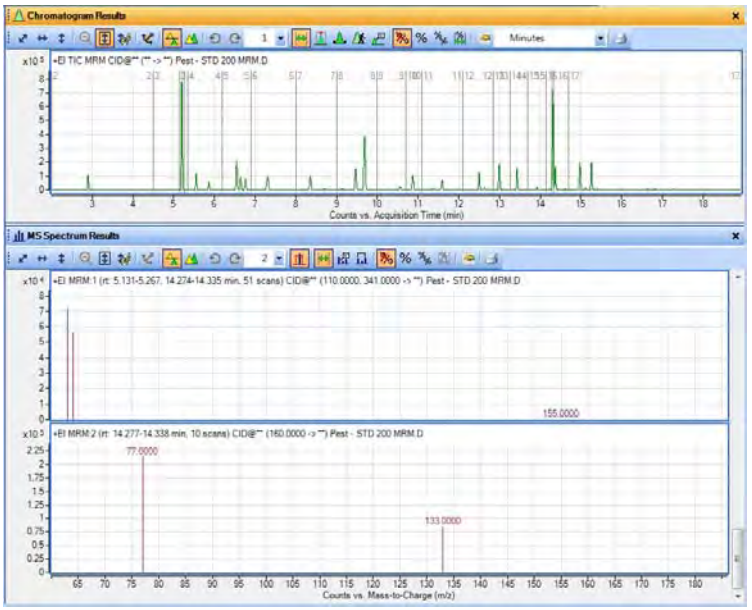
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		**Первый спектр имеет переходы из обоих временных диапазонов. Второй спектр имеет только один временной диапазон, потому что переход 160,00 -> ** не существует в пике на уровне 5,2 мин.**

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

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
6 Вычитайте фоновый спектр каждый раз, когда извлекается спектр пика из **Pest - STD 200 MRM.d**. • Удалите все сканирования в разделе спектров пользователя (User Spectra) в навигаторе по данным (Data Navigator). • Извлеките фоновый спектр, который является средним между спектрами в начале и конце пика. • Извлеките спектр пика из интегрированных пиков.	**a** Щелкните строку User Spectra (Спектр пользователя) в навигаторе по данным (Data Navigator). Щелкните правой кнопкой мыши строку User Spectra (Спектры пользователя) и выберите команду **Delete (Удалить)**. **b** Нажмите кнопку **Yes (Да)**. **c** В обозревателе методов (Method Explorer) выберите пункты **Spectrum (Спектр) > Extract (MS/MS) (Извлечь (MC-MC))**. **d** Выберите вкладку **Peak Spectrum Extraction (MS/MS)** (Извлечение спектра пиков (MC/MC)), если ее не видно. **e** В поле **Peak spectrum background (Фон спектра пика) MS/MS (MCMC)** выберите пункт **Average of spectra at peak start and end (Среднее для спектров начала и конца пика)**. **f** На панели инструментов в окне результатов для хроматограммы (Chromatogram Results) щелкните значок **Peak Select (Выбор пиков)** . **g** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (Интегрировать)**. **h** Выберите пик на уровне 5,206 мин. **i** Щелкните правой кнопкой мыши и в контекстном меню выберите команду **Extract Peak Spectrum (Извлечь спектр пика)**.	• Обратите внимание, что в конце этого процесса из всех извлеченных спектров пика будет автоматически исключен указанный фоновый спектр.

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

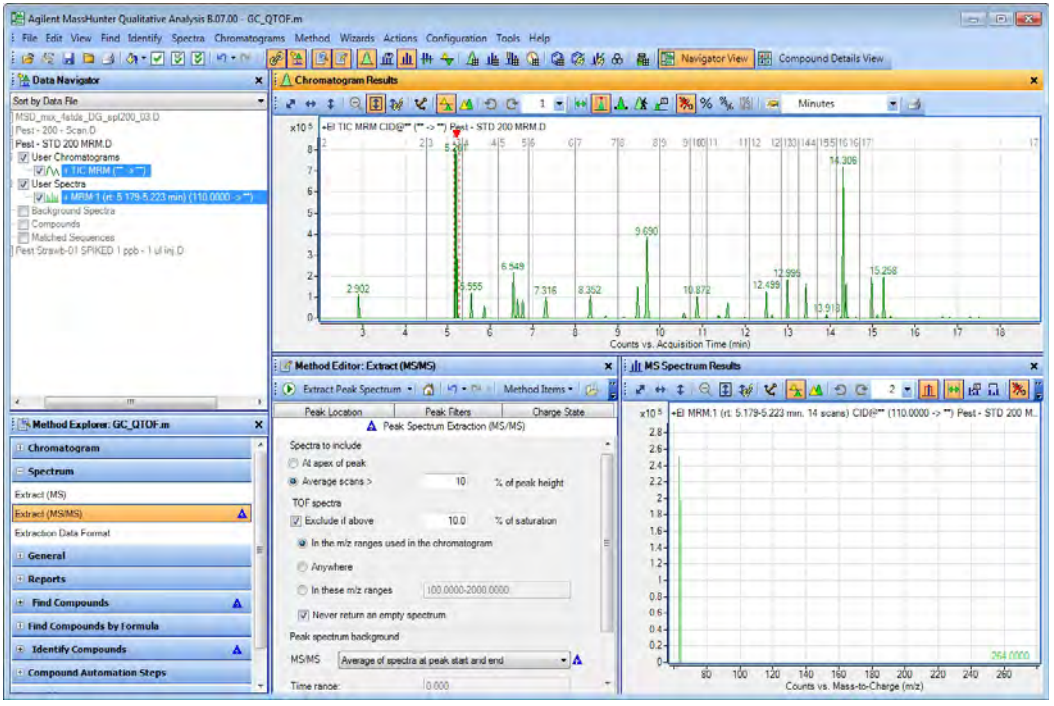


Рис. 23 Спектры пиков с исключенным фоновым спектром пика

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
7 Интегрируйте и извлеките спектры пиков из файла данных Pest - STD 200 MRM.d.	**a** Выберите хроматограмму TIC MRM в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)**.	• Спектры пиков, извлеченные вручную на предыдущем шаге, будут автоматически удалены, так как пункт **Clear previous peak spectra (Очистить предыдущие спектры пиков)** отмечен по умолчанию на вкладке результатов: Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (MC/MC)) > Results (Результаты).

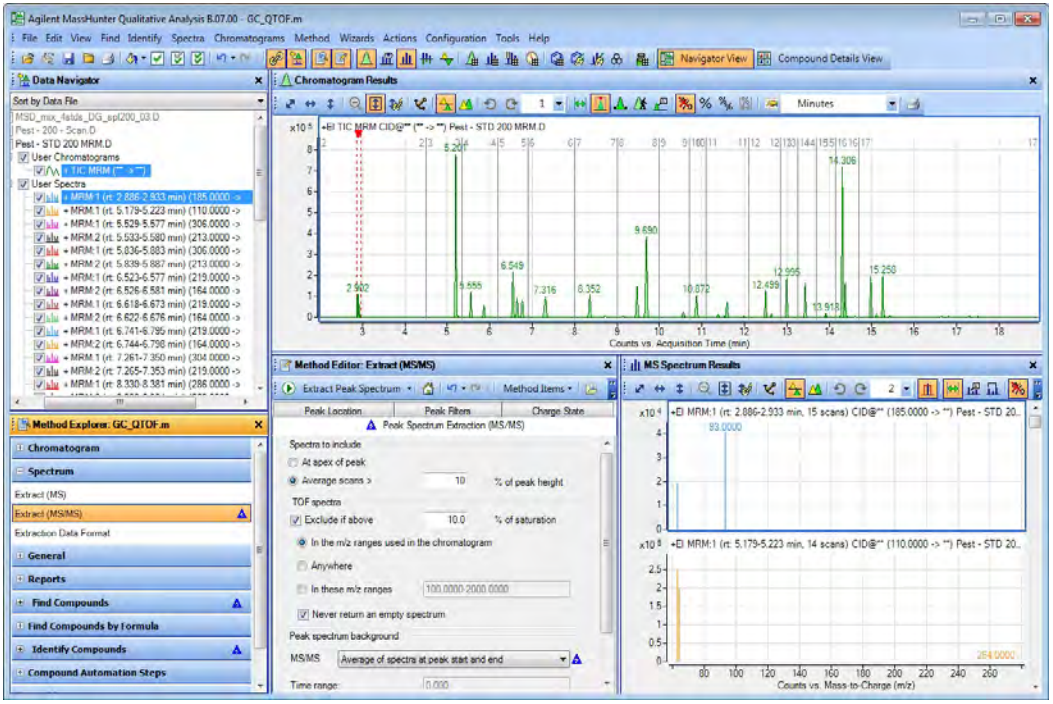


Рис. 24 Интегрирование и извлечение спектров пиков

Задание 9. Извлечение спектров из хроматограммы

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Удалите результаты интегрирования и спектры пиков.	**a** Выберите файл данных Pest - Std 200 MRM.d. **b** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Include Peak Spectra (Включить спектры пиков)**.	• Либо можно выбрать пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Only Chromatograms (Только хроматограммы)**, если не следует удалять спектры пиков.

Задание 10. Добавление примечаний

Можно добавить примечание в виде изображения или текста к следующим графическим окнам.

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

При сохранении результатов для файла данных примечания также сохраняются.

Задание 10. Добавление примечания

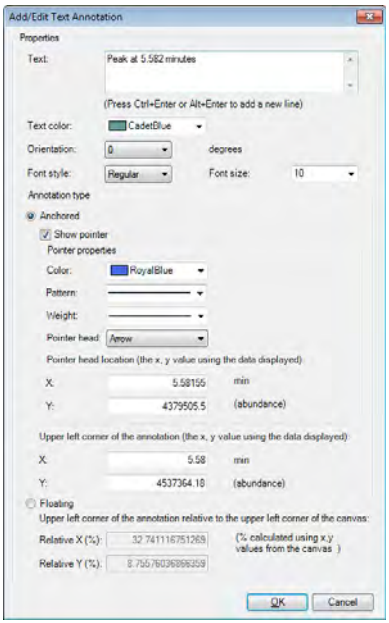
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Скройте другие хроматограммы.	**a** Установите отметку рядом с пунктом MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Выберите команды **Edit (Изменить) > Show (Показать) > Only Highlighted (Только выделенные)**.	• Хроматограммы для других файлов данных будут автоматически скрыты.
2 Выберите место в хроматограмме, куда следует добавить текстовое примечание.	**a** В окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results) на панели инструментов выберите элемент **Annotation (Примечание)** (). **b** Переместите курсор на место в области хроматограммы, где необходимо добавить примечание. **c** Щелкните правой кнопкой мыши и выберите команду **Add Text Annotation (Добавить текстовое примечание)**.	• Вместо курсора появится крестик. Используйте этот курсор для выбора точного положения примечания. • Панель инструментов для примечаний (Annotate) доступна в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). • Также можно добавлять примечания к окну результатов спектра МС (MS Spectrum Results).

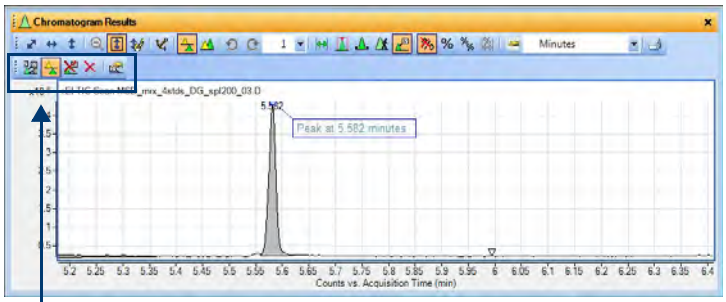
Задание 10. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Добавьте информацию о текстовом примечании в диалоговом окне Add/Edit Text Annotation (Добавление/изменение текстового примечания).	**a** Введите **Text (Текст)** для примечания. **b** Выберите пункт **Text color (Цвет текста)**. **c** Выберите пункт **Orientation (Расположение)**. **d** Выберите пункты **Font style (Стиль шрифта)** и **Font size (Размер шрифта)**. **e** Щелкните пункт **Anchored (Закрепленное)** или **Floating (Плавающее)**. В случае варианта **Anchored (Закрепленное)** выберите параметры указателя для текстового примечания. В случае варианта **Floating (Плавающее)**, можно менять относительное положение. Легче менять положение в графическом окне в интерактивном режиме. **f** Нажмите кнопку **OK**.	• К хроматограмме или спектру можно добавлять несколько примечаний. • С помощью значков на панели инструментов для примечаний (Annotate) можно выбирать все примечания, а также удалять и изменять их.

Задание 10. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии





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

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

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

4	Выберите место в хроматограмме, куда следует добавить примечание-изображение.	**a** Переместите курсор на место в области хроматограммы, где необходимо добавить примечание. **b** Щелкните правой кнопкой мыши и выберите команду **Add Image Annotation (Добавить примечание-изображение)**.	• Можно добавлять файлы с изображениями в формате JPG или MOL.

Задание 10. Добавление примечания (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Добавьте информацию о текстовом примечании в диалоговом окне Add/Edit Text Annotation (Добавление/изменение текстового примечания).	**a** Выберите примечание-изображение. **b** Укажите значение 50 для ширины шкалы. **c** Отметьте пункт **Lock aspect ratio (Зафиксировать соотношение размеров)**. **d** Выберите пункт **Floating (Плавающее)**. Можно изменить относительное положение. Легче менять положение в графическом окне в интерактивном режиме. **e** Нажмите кнопку **OK**. **f** Переместите изображение в верхний правый угол хроматограммы.	• Файл Agilent_Logo.tif содержится в папке \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.07.00\en-US\ Letter. Его необходимо преобразовать в файл в формате JPG. • К хроматограмме или спектру можно добавлять несколько примечаний.

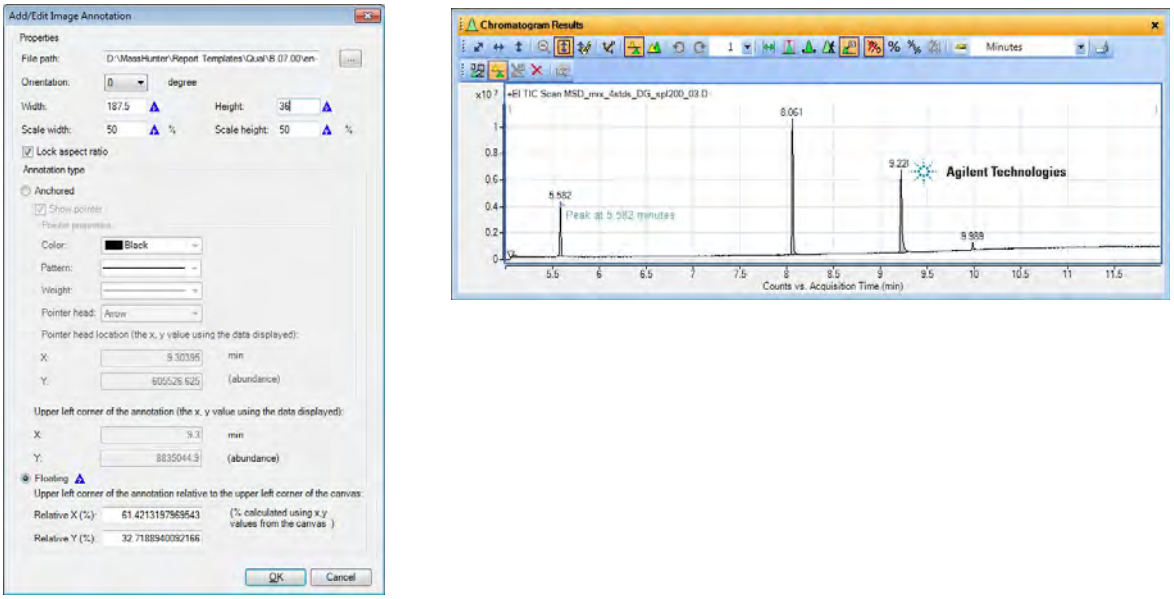
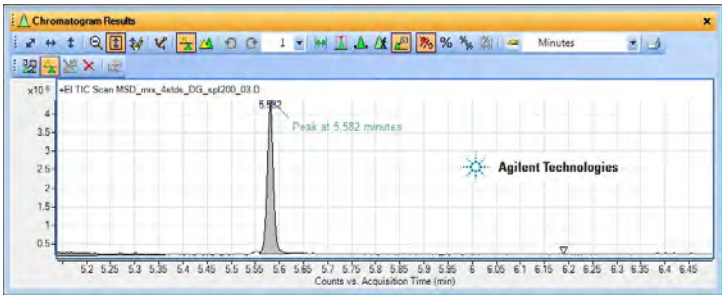


Рис. 26 Диалоговое окно Add/Edit Image Annotation (Добавление/изменение примечания-изображения) и окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

Задание 10. Добавление примечания (продолжение)

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



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

Рис. 27 Диалоговое окно Add/Edit Image Annotation (Добавление/изменение примечания-изображения) и окно результатов для хроматограмм (Chromatogram Results)

7 Перейдите назад к инструменту выбора диапазона (Range Select) в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Сначала удалите примечание.	**a** Чтобы удалить все примечания, щелкните значок  . **b** Щелкните значок  (Range Select (Выбор диапазона)) на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results).	• Если необходимо сохранить примечания с результатами файла данных, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98. • Можно переключаться между пятью различными инструментами на панели инструментов в окне результатов для хроматограмм (Chromatogram Results). Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help). Этими пятью инструментами являются: ◦ Выбор диапазона (Range Select) ◦ Выбор пиков (Peak Select) ◦ Ручное интегрирование (Manual Integration) ◦ Просмотр хроматограммы (Walk Chromatogram) ◦ Мышь для примечаний (Annotation Mouse)

Задание 11. Добавление измерителя для массы

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

При сохранении результатов для файла данных измерители также сохраняются.

Задание 11. Добавление измерителя для массы

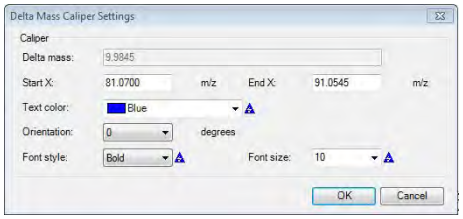
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Интегрируйте и извлеките спектры пиков из MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	**a** Установите отметку рядом с пунктом MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** Выберите команды **Edit (Изменить) > Show (Показать) > Only Highlighted (Только выделенные)**. **c** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)**. **d** Закройте окно редактора методов (Method Editor).	

Задание 11. Добавление измерителя для массы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Добавьте измеритель к спектру пика, созданному в предыдущем задании.	**a** В окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results) на панели инструментов выберите элемент **Delta Mass Caliper (Измеритель погрешности (дельта) для массы)** (). **b** (дополнительно) На панели инструментов измерителя (Caliper) в качестве типа измерителя выберите **Profile Point to Point (Линия от точки до точки)**. **c** Увеличьте масштаб от 79 к 99 *m/z*. **d** Переместите курсор на место в области спектра, где необходимо добавить измеритель. **e** Перетащите курсор к конечной точке измерителя в спектре. По мере перетягивания курсора будет меняться значение разности (дельта) для массы. Когда вы отпустите кнопку мыши, измеритель будет добавлен.	• Курсор изменится на стрелку. Используйте этот курсор, чтобы обозначить начальную и конечную точку измерителя. • Невозможно выбрать тип измерителя, если спектр является центром массы, так как **Profile Point to Point (Линия от точки до точки)** никак не влияет на данные центра массы. • На вершине выбранного пика устанавливается «треугольный» курсор.
3 Измените измеритель, чтобы использовался другой цвет.	**a** Щелкните измеритель, созданный в предыдущем шаге. **b** Нажмите кнопку Caliper Properties (Свойства измерителя) () на панели инструментов в окне результатов спектра MC (MS Spectrum Results). **c** (дополнительно) Введите значения для параметров **Start X (Начало X)** и **Start Y** (Начало Y). **d** Выберите пункт **Text color (Цвет текста)**. **e** Выберите пункты **Font style (Стиль шрифта)** и **Font size (Размер шрифта)**. **f** Нажмите кнопку **OK**.	• К спектру можно добавлять несколько измерителей. • С помощью значков на панели инструментов для измерителя (Caliper) можно выбирать все измерители, а также удалять и изменять их.

Задание 11. Добавление измерителя для массы (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии



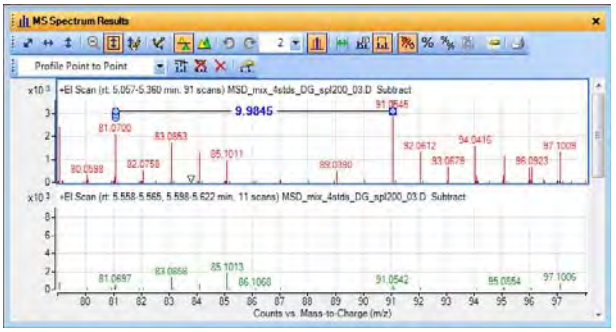


Рис. 28 Диалоговое окно Delta Mass Caliper Settings (Параметры измерителя разности (дельта) массы) и окно результатов спектра МС (MS Spectrum Results)

4 Удалите результаты интегрирования и спектры.	**a** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Clear Results (Очистить результаты) > Include Peak Spectra (Включить спектры пиков)**. **b** В окне результатов спектра МС (MS Spectrum Results) щелкните по инструменту выбора диапазона **Range Select**.	• Если необходимо сохранить измерители с результатами файла данных, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Упражнение 2
Поиск и определение

Задание 12. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы 60
Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library) 65
Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM) 70
Задание 15. Найдите соединения по интегрированию 74
Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента 78
Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке 91
Задание 18. Сохраните результаты 98

В процессе выполнения этих заданий будут осуществляться поиск и определение соединений в файлах данных ГХ/МС.

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

- Шаги – следуйте этим общим указаниям для дальнейшего самостоятельного изучения программы.
- Подробные инструкции – используйте их, если необходима помощь или если предпочитаете пошаговый процесс обучения.
- Комментарии – здесь вы найдете советы и дополнительную информацию о каждом этапе упражнения.

Задание 12. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы

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

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

Задание 12. Найдите соединения, используя деконволюцию хроматограммы (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** .	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• Алгоритм нахождения соединений по деконволюции хроматограммы работает с файлами данных как ГХ/QQQ, так и ГХ/Q-TOF.

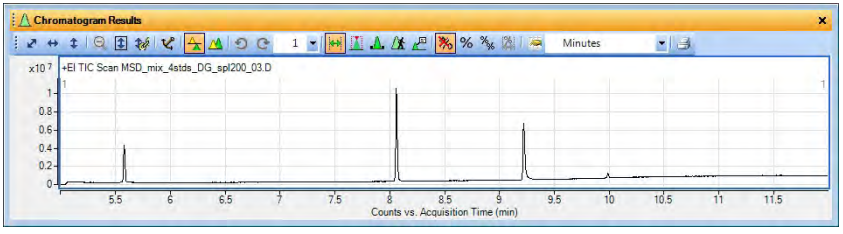


Рис. 29 Хроматограмма TIC из Pest - 200 - Scan.d

Задание 12. Найдите соединения, используя деконволюцию хроматограммы (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	• Для этих примеров загрузите рабочий процесс скрининга соединений (Compound Screening) ГХ/Q-TOF.
3 Поиск соединений с использованием алгоритма деконволюции хроматограммы. • Выберите интегратор Agile. • Введите пороговое значение SNR (соотношение сигнал — шум), равное 20. • Введите значения 100 ppm для **Left m/z delta (Дельта m/z слева)** и **Right m/z delta (Дельта m/z справа)**.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Find (Поиск) Compounds (Соединения) > Find by Chromatogram Deconvolution (Найти по деконволюции хроматограммы).** **b** На вкладке настроек (Settings), под фильтром пиков (Peak) введите число 20 для **порогового значения SNR**. **c** Выберите **PPM** для **дельта-значений m/z**. **d** Введите значение 100 для **Left m/z delta (Дельта m/z слева)** и значение 100 для **Right m/z delta (Дельта m/z справа)**.	• Поиск по деконволюции хроматограммы также доступен в разделе скрининга соединений (Compound Screening) ГХ/ Q-TOF. • Если имеется массовая характеристика пиков, введите значение AMU (а. е. м.), равное 0,3 для **Left m/z delta (Дельта m/z слева)** и 0,7 для **Right m/z delta (Дельта m/z справа)** • Можно извлечь полный набор результатов для выделенного соединения после его нахождения с помощью пунктов меню **Compounds (Соединения) > Extract Complete Result Set (Извлечь полный набор результатов)**.

Задание 12. Найдите соединения, используя деконволюцию хроматограммы (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

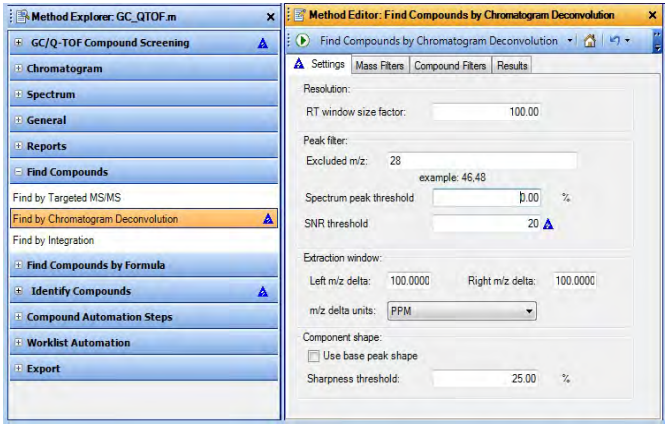


Рис. 30 Вкладка настроек (Settings) в разделе поиска по деконволюции хроматограммы (Find by Chromatogram Deconvolution)

- Используется для извлечения EIC, спектров МС и МС/МС.

e Перейдите на вкладку **Results (Результаты)**.

f Поставьте отметки для пунктов **Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum (Извлечь EIC, извлечь ECC, извлечь очищенный спектр)** и **Extract raw spectrum (Извлечь неочищенный спектр)**.

g Щелкните для запуска алгоритма **Find Compounds by Chromatogram Deconvolution (Поиск соединений по деконволюции хроматограммы)** в файле данных.

h При необходимости щелкните команду **View (Просмотр) > Compound List (Список соединений)**.

- Программа качественного анализа (Qualitative Analysis) найдет 4 соединения, удовлетворяющие заданным условиям.
- Если не указать файл данных, выполнение алгоритма может занять много времени.

Задание 12. Найдите соединения, используя деконволюцию хроматограммы (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4 Изучите соединения. См. Рис. 31 на стр. 64.	**a** Выберите **2** в поле **Maximum number of list panes (Макс. количество панелей списка)** на панели инструментов результатов спектра МС (Spectrum Results). **b** Щелкните значок **Hide Empty Columns (Скрыть пустые столбцы)** в окне списка соединений (Compound List). **c** Щелкните на первом соединении в окне навигатора по данным (Data Navigator). **d** При активном окне навигатора по данным (Data Navigator) используйте клавиши со стрелками для переключения соединений.	• Отображение данных обоих спектров является удобным способом просмотра полной информации о соединении. • Обратите внимание, что отображаются данные обоих спектров — очищенного и неочищенного.

Задание 12. Найдите соединения, используя деконволюцию хроматограммы (ГХ/МС)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

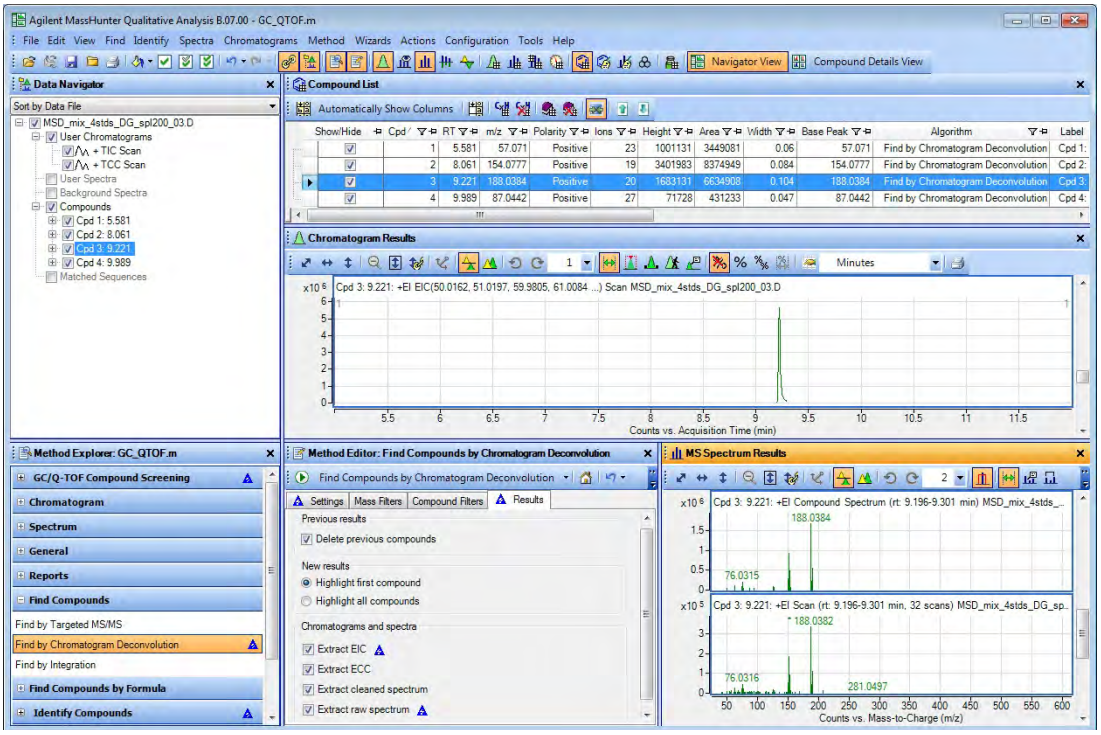


Рис. 31 Поиск соединений по результатам деконволюции хроматограммы

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

В процессе выполнения этих заданий будут осуществляться определение и генерирование формул для соединений, найденных в «Задание 12. Поиск соединений по деконволюции хроматограммы» на стр. 60. Вы сможете приступить к выполнению этого задания, если приобрели библиотеку *NIST11.l* (или более поздней версии) или используете библиотеку *demo.l*. Если доступны две библиотеки, можно использовать обе.

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Выполните поиск всех соединений в библиотеке файла данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	**a** Выделите соединения в файле данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в окне навигатора по данным (Data Navigator). **b** В окне обозревателя методов (Method Explorer) щелкните **Identify Compounds (Определить соединения) > Search Unit Mass Library (Поиск в библиотеке массовой характеристики пиков)**. **c** Во вкладке настроек (Settings) нажмите кнопку **Add Library (Добавить библиотеку)**. Выберите библиотеку **demo.l** и нажмите кнопку **OK**. **d** (необязательно) Во вкладке настроек (Settings) нажмите кнопку **Add Library (Добавить библиотеку)**. Выберите библиотеку **NIST11.l** и нажмите кнопку **OK**. **e** (необязательно) Выберите **Stop at first library match (Остановить поиск по библиотеке при первом совпадении)** при **поиске в нескольких библиотеках (Multi-Library search)**. **f** Выберите **Identify (Определить) > Search Library for Compounds (Поиск соединений в библиотеке)** в главном меню. Можно также щелкнуть значок **Search Library for Compounds (Поиск соединений в библиотеке)**,  чтобы запустить алгоритм. **g** Щелкните **View (Просмотр) > Difference Results (Разница результатов)**. **h** Щелкните **View (Просмотр) > Structure Viewer (Средство просмотра структуры)**. **i** Щелкните **View (Просмотр) > Compound Identification Results (Результаты определения соединений)**, если необходимо отобразить это окно. **j** Если необходимо, перейдите на вкладку окна **Compound Identification Results (Результаты определения соединений)**. Это окно разделено на вкладки окна результатов хроматограммы (Chromatogram Results).	• Можно также выбрать скрининг соединений (Compound Screening) ГХ/Q-TOF > Определить с помощью поиска в библиотеке в обозревателе методов (Method Explorer). В окне редактора методов (Method Editor) отображается тот же раздел. • Demo.l и Nist11 должны быть установлены папке \MassHunter\Library. • Обратите внимание, что многие соединения определяются после поиска в библиотеке *NIST11.l*. • Если у вас нет библиотеки *NIST11.l*, выберите другую доступную библиотеку. • Если вы выбрали две библиотеки (или более), и у вас установлен параметр **Stop at first library match (Остановить поиск по библиотеке при первом совпадении)**, алгоритм поиска в библиотеках начнет поиск с библиотеки, первой в списке. Поиск останавливается по нахождении соединения. Если соединение не определено, начинается поиск в следующей библиотеке. Поиск закончится, когда соединение будет найдено, или когда поиск дойдет до конца последней библиотеки. • Используйте программу редактирования библиотек (Library Editor) для изменения библиотек.**L**, которые используются алгоритмом поиска в библиотеке (Search Library). Эта программа устанавливается вместе с программой количественного анализа (Quantitative Analysis) Agilent MassHunter. Щелкните значок , чтобы запустить программу.

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2 Отображение столбцов результатов спектральной библиотеки (Spectral Library Results) в окне списка соединений (Compound List) и в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results).	**a** Нажмите кнопку «Отображать столбцы поиска в библиотеке» (Show Library Search Columns, ) на панели инструментов окна списка соединений (Compound List) и на панели инструментов окна результатов определения соединений (Compound Identification Results). **b** Нажмите кнопку «Скрыть пустые столбцы» (Hide Empty Columns, ) на панели инструментов окна списка соединений (Compound List) и на панели инструментов окна результатов определения соединений (Compound Identification Results).	

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

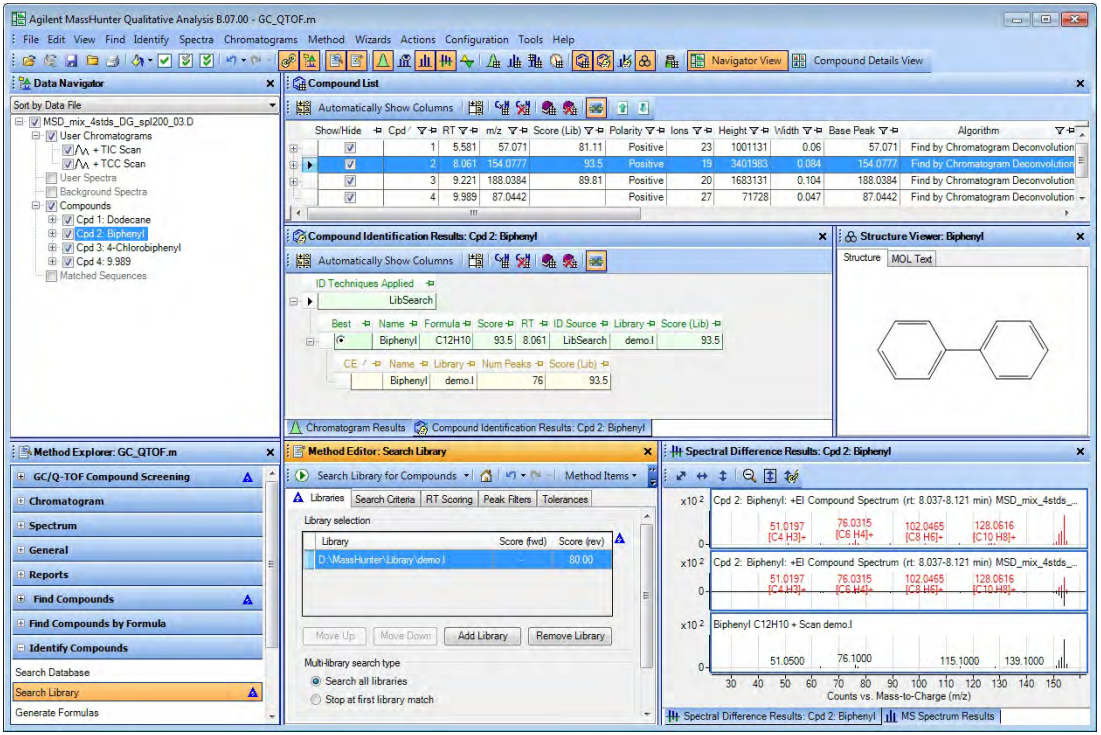


Рис. 32 Соединения в файле данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D и результаты поиска в библиотеках

3	Переход к отображению сведений о соединениях (Compound Details View) для рассмотрения соединений.	**a** Щелкните Compound Details View на главной панели инструментов. **b** Закройте окно **результатов спектра фрагмента соединений (Compound Fragment Spectrum Results)**.	• Окно результатов спектра фрагмента соединений (Compound Fragment Spectrum Results) будет содержать результаты только в том случае, если при работе с алгоритмом поиска по формуле (Find by Formula) было выполнено подтверждение фрагмента.

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4 Рассмотрите результаты в представлении сведений о соединениях (Compound Details View).	**a** Щелкните значок наложения (Overlaid) в окне результатов хроматограммы соединения (Compound Chromatogram Results). **b** Разверните результаты в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results).	• Больше информации о представлении сведений о соединениях (Compound Details View) можно найти в интерактивной справке (Help). Представление сведений о соединениях (Compound Details View) может быть очень полезным при просмотре результатов, возвращенных алгоритмом поиска по формуле (Find by Formula), если файл данных получен в режиме всех ионов (All Ions).

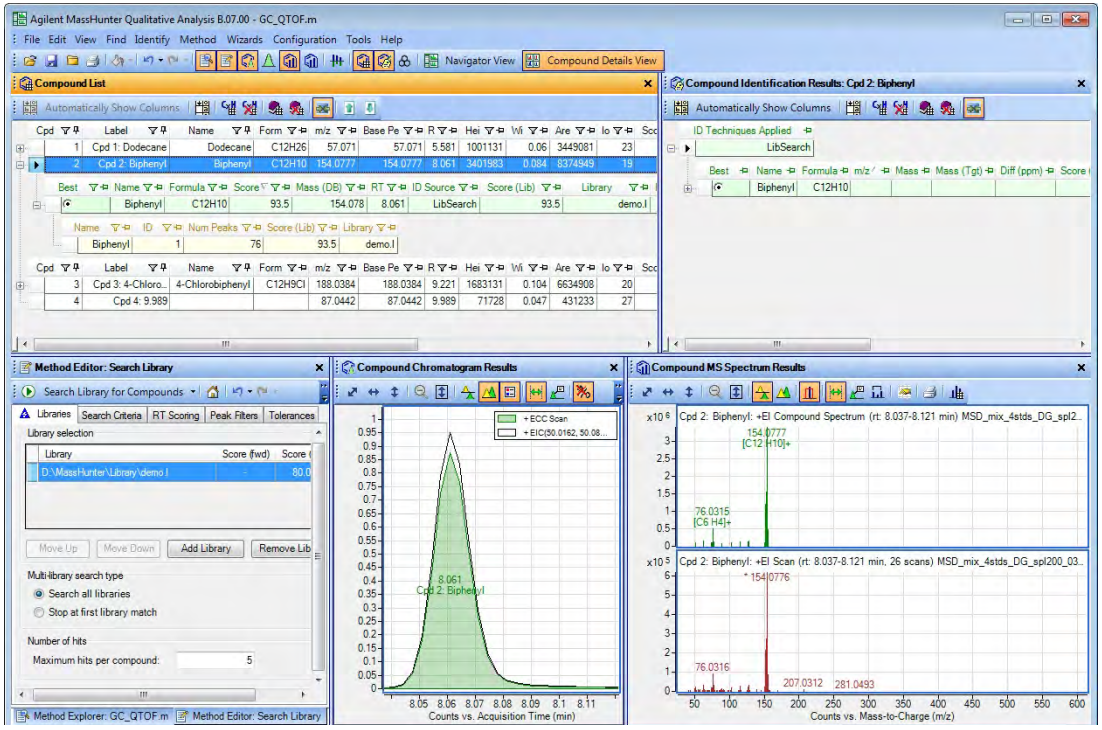


Рис. 33 Отображение соединений в файле данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D в представлении сведений о соединении (Compound Details View)

Задание 13. Определить соединения, используя алгоритм поиска в библиотеках (Search Library)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5 Переключитесь с представление навигатора (Navigator View).	• Нажмите кнопку  на главной панели инструментов.	
6 Закройте файл данных.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.	• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

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

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **Pest - STD 200 MRM.d**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **Pest - STD 200 MRM.d** в папке образцов файлов данных **GC Pesticides (Пестициды ГХ)**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• Общий рабочий процесс (General Workflow) используется при работе с данными ГХ/QQQ. При работе с данными ГХ/Q-TOF можно также использовать общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).

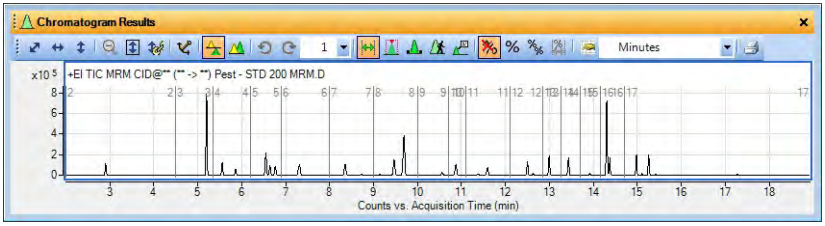


Рис. 34 Хроматограмма TIC из файла Pest - STD 200 MRM.d

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ QQQ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	
3 Поиск соединений с использованием алгоритма MRM.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Find (Поиск) Compounds (Соединения) > Find by MRM (Найти по MRM).** **b** Нажмите кнопку **Group transitions by compound name (Групповые переходы по названию соединения)**. **c** Перейдите на вкладку **Integrator (Интегратор)**. **d** Выберите интегратор **Agile 2**.	• Можно выбрать отрезок хроматограммы, в котором вы предполагаете найти соединения. • Можно извлечь полный набор результатов для выделенного соединения после его нахождения с помощью пунктов меню **Compounds (Соединения) > Extract Complete Result Set (Извлечь полный набор результатов)**.

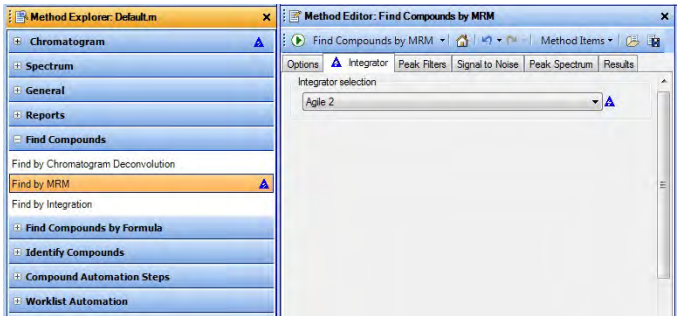


Рис. 35 Вкладка интегратора в разделе поиска по MRM (Find by MRM) редактора методов (Method Editor)

	e Щелкните для запуска алгоритма **поиска соединений по MRM (Find Compounds by MRM)** в файле данных. **f** При необходимости щелкните команду **View (Просмотр) > Compound List (Список соединений)**. **g** Если необходимо, щелкните **View (Просмотр) > Compound Identification Results (Результаты определения соединений)**.	• Программа качественного анализа (Qualitative Analysis) найдет 28 соединений, удовлетворяющих заданным условиям.

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4 Изучите соединения. См. Рис. 36 на стр. 73.	**a** Выберите **2** в поле **Maximum number of list panes (Макс. количество панелей списка)** на панели инструментов результатов спектра MC (Spectrum Results). **b** Щелкните значок **Automatically Show Columns (Автоматически показывать столбцы)** в окне списка соединений (Compound List) и в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results). **c** Щелкните на первом соединении в окне навигатора по данным (Data Navigator). **d** При активном окне навигатора по данным (Data Navigator) используйте клавиши со стрелками для переключения соединений.	• В окне результатов определения соединения в столбце Precursor [Acq Method] (Исходный (Метод сбора)) отобразится исходный ион, а в столбце Product [Acq Method] (Дочерний (Метод сбора)) отобразится дочерний ион.

Задание 14. Найдите соединения, используя MRM (только MRM)

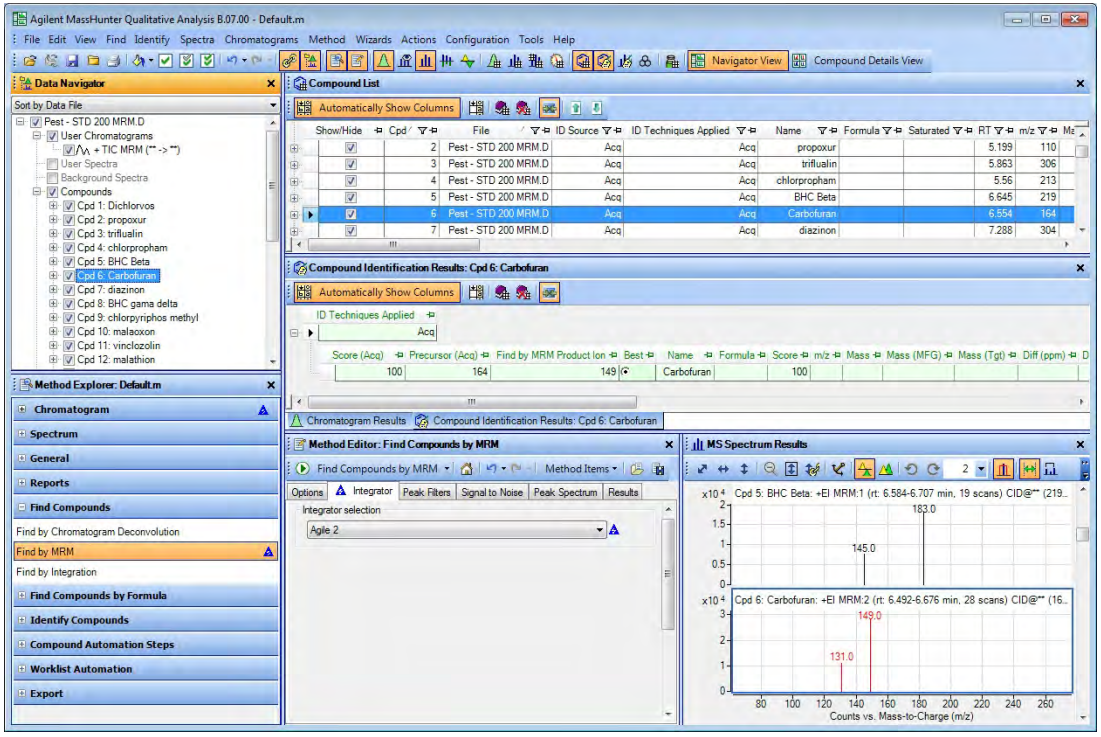
Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
		

Рис. 36 Поиск по результатам MRM

5 Закройте файл данных.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Щелкните **Close (Закрыть)**.	• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Задание 15. Найдите соединения по интегрированию

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

Задание 15. Найдите соединения, используя интегрирование

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• Общий рабочий процесс (General Workflow) используется при работе с данными ГХ/QQQ. При работе с данными ГХ/Q-TOF можно также использовать общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).

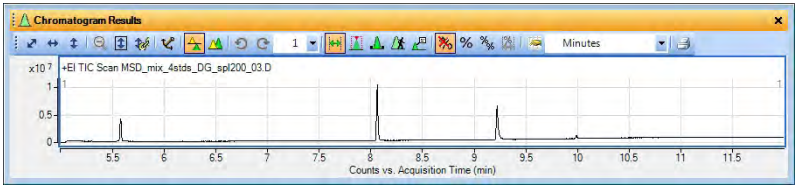


Рис. 37 Хроматограмма TIC из файла MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	

Задание 15. Найдите соединения, используя интегрирование

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
3 Поиск соединений с использованием алгоритма интегрирования.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Find (Поиск) Compounds (Соединения) > Find by Integration (Найти по интегрированию).** **b** Выберите интегратор **MS/MS (GC)** (МС-МС (ГХ)).	• Можно выбрать отрезок хроматограммы, в котором вы предполагаете найти соединения. • Можно извлечь полный набор результатов для выделенного соединения после его нахождения с помощью команды **Compounds (Соединения) > Extract Complete Result Set (Извлечь полный набор результатов)**.

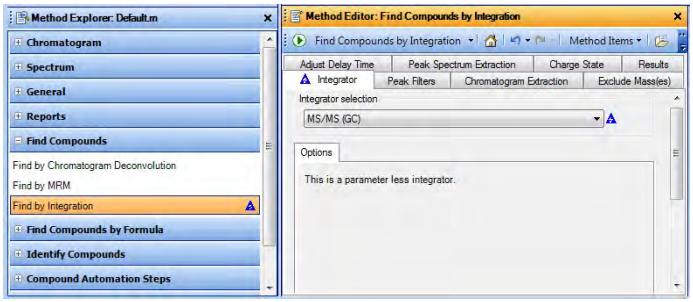


Рис. 38 Вкладка интегратора в разделе поиска по интегрированию (Find by Integration) редактора методов (Method Editor)

	c Щелкните для запуска алгоритма **поиска соединений по интегрированию (Find Compounds by Integration)** в файле данных. **d** При необходимости щелкните команду **View (Просмотр) > Compound List (Список соединений)**.	• Программа качественного анализа (Qualitative Analysis) найдет шесть соединений, удовлетворяющих заданным условиям.

Задание 15. Найдите соединения, используя интегрирование

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4 Изучите соединения. См. Рис. 36 на стр. 73.	**a** Выберите **2** в поле **Maximum number of list panes (Макс. количество панелей списка)** на панели инструментов результатов спектра MC (Spectrum Results). **b** Щелкните значок **Automatically Show Columns (Автоматически показывать столбцы)** в окне списка соединений (Compound List). **c** Щелкните значок **Hide any currently empty columns (Скрыть все пустые в настоящий момент столбцы)** в окне списка соединений (Compound List). **d** Щелкните на первом соединении в окне навигатора по данным (Data Navigator). **e** При активном окне навигатора по данным (Data Navigator) используйте клавиши со стрелками для переключения соединений.	

Задание 15. Найдите соединения, используя интегрирование

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

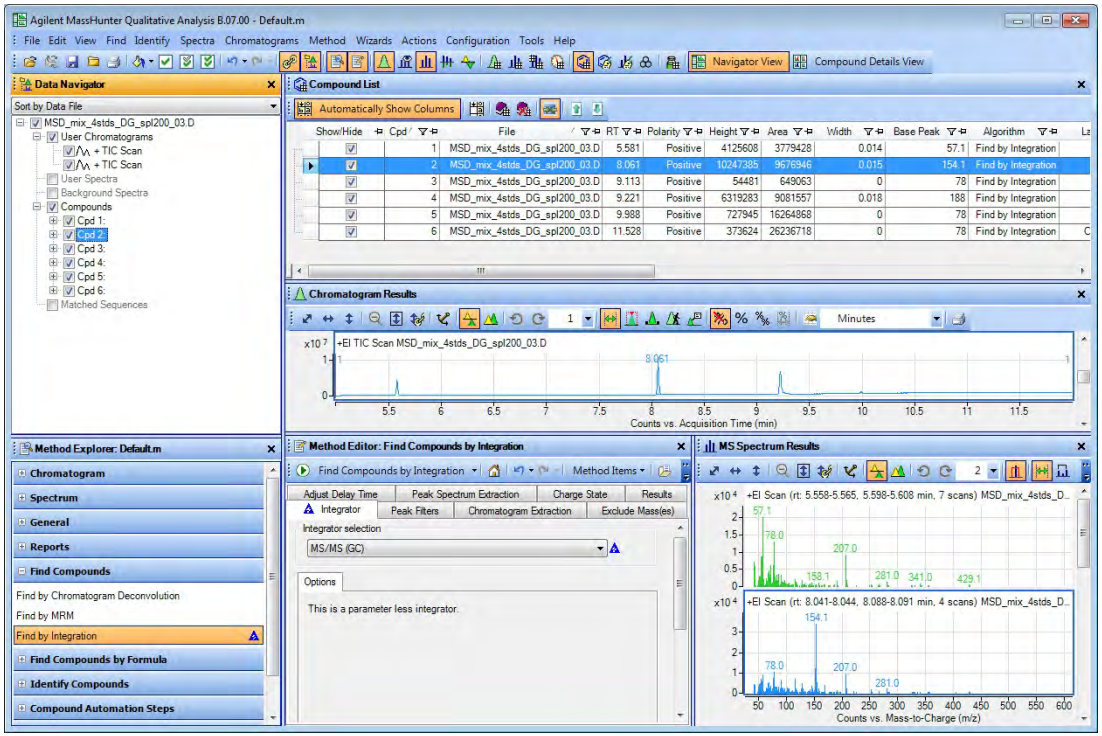


Рис. 39 Поиск по результатам интегрирования

5 Закройте файл данных.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов. **c** Щелкните **Close (Закрыть)**.	• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Подтверждение фрагмента целевых соединений может выполняться по файлам данных ВЭЖХ-МС, полученных в режиме МС-МС для всех ионов. На приборе ВЭЖХ/Q-TOF это выполняется посредством изменения энергий столкновения при сборе данных от 2 до 4. Рекомендованные к применению энергии столкновений составляют 0 В, 20 В и 40 В. Спектр 0 В считается «низкоэнергетическим каналом», который преимущественно показывает исходные ионы элюирующих соединений, в то время как спектры 20 В и 40 В считаются «высокоэнергетическими каналами», демонстрирующими фрагментные ионы всех одновременно элюирующих соединений. Отсюда и название МС-МС для всех ионов. Похожий эксперимент можно провести на приборе ВЭЖХ-TOF, меняя напряжения фрагментатора между 2–4 значениями (например, 125 В, 200 В и 275 В). Для «низкоэнергетического канала» напряжение фрагментатора устанавливается таким образом, чтобы избежать фрагментации внутри источника большинства целевых соединений, в то время как спектр «высокоэнергетического канала» демонстрирует ионы фрагментов элюирующих соединений. Использование более чем одного высокоэнергетического канала обеспечивает фрагментацию соединений с различной стабильностью.

Подтверждение фрагментов также возможно для данных ГХ/Q-TOF ЭУ, что в сущности показывает в основном фрагментные ионы в каждом спектре. Здесь присутствует только высокоэнергетический канал, и в большинстве случаев молекулярные ионы не присутствуют в спектре. Поэтому необходимо поставить флажок в поле **Molecular ion optional (Дополнительные молекулярные ионы)**. Алгоритм вначале выбирает «n» фрагментных ионов из библиотеки спектров ЭУ-МС, в основе которой лежит интенсивность и величина *m/z* (предпочтение отдается фрагментным ионам с более высоким значением *m/z*, поскольку они содержат больше структурной информации). Затем алгоритм извлекает ионные хроматограммы этих ионов в промежуток времени, близкий к времени удерживания целевых веществ в библиотеке, и создает список хроматографических пиков целевых веществ. После этого он пытается найти группы пиков, объединяемых в кластеры по ВУ, и выбирает ион сравнения и ионы для подтверждения фрагмента. Ион сравнения может быть молекулярным ионом при его наличии, но это не является обязательным условием. Затем алгоритм вычисляет,

насколько успешно проходит коэлюирование выбранных хроматографических пиков. Целевое соединение квалифицируется в том случае, если оказывается, что коэлюируют пики с количеством ионов, превышающим устанавленный пользователем минимальный порог.

Режим **Molecular ion optional (Дополнительные молекулярные ионы)** также может использоваться в случае с данными ВЭЖХ-МС, если исходный ион соединения в «низкоэнергетическом канале» показывает раздвоение пика вследствие насыщения. В этом случае молекулярный ион не будет использоваться в качестве иона сравнения; вместо этого ион сравнения и ионы для подтверждения фрагмента выбираются из «высокоэнергетических каналов».

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

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **Tomato_spiked.D**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **Tomato_spiked.d** в папке образцов файлов данных **GCMS Pesticide (Пестициды ГХ/МС)**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• Общий рабочий процесс (General Workflow) используется при работе с данными ГХ/QQQ. • При работе с данными ГХ/Q-TOF можно также использовать общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).

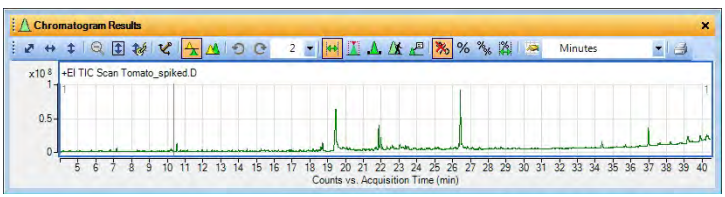


Рис. 40 Хроматограмма TIC из файла Tomato_spiked.d

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

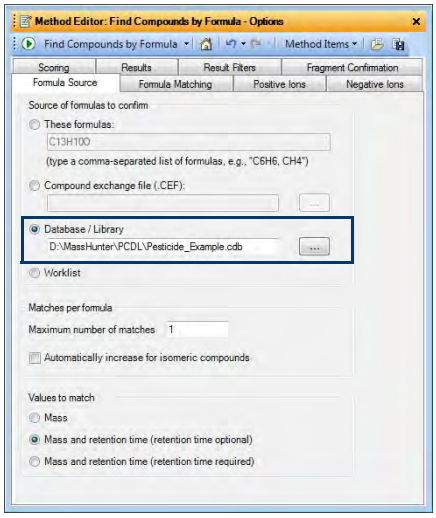
Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	
3 Загрузите файл метода GCQTOF_Pesticide_Example.m.	**a** Нажмите **Method (Метод) > Open (Открыть).** **b** Выберите метод **GCQTOF_Pesticide_Example.m** и нажмите кнопку **Open (Открыть)**.	• Этот метод установлен в папке \\MassHunter\methods\B.07.00. • Синие треугольники, отображаемые при загрузке метода, пока можно игнорировать.
4 Сохраните метод в *iii*_GCQTOF_Pesticide_Example.m, где «*iii*» — ваши инициалы.	**a** В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save As (Сохранить как)**. **b** Наберите **iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m**. **c** Нажмите кнопку **Save (Сохранить)**.	• Обратите внимание, что сохранение метода приведет к тому, что исчезнут все голубые треугольники, означающие изменение значений в открытом методе.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5 Чтобы найти соединение по формуле, верифицируйте параметры.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Find (Поиск) Compounds by Formula (Соединения по формуле) > Find by Formula - Options (Найти по формуле — Функции).** **b** Перейдите на вкладку **Formula Source** (Источник формулы). **c** Нажмите **Database/Library (База данных/Библиотека**. **d** Выберите библиотеку **Pesticide_Example.cdb** в папке PCDL. **e** Перейдите на вкладку **Formula Matching (Сопоставление формул)**. **f** Выберите **Symmetric (ppm) (Симметричные (ppm)** для **Possible m/z (Возможные m/z)** и просмотрите значение. **g** Поставьте флажок в поле **Limit EIC extraction range (Ограничить диапазон экстракции EIC)**, выбрать **Symmetric (Симметричные)** и указать значение `1,0` в поле **Expected retention time (Ожидаемое время удерживания)**.	• Можно запустить алгоритм Найти по формуле (FbF) в файлах данных ГХ/Q-TOF ЭУ. Также можно воспользоваться этим алгоритмом при работе с файлами данных ВЭЖХ-МС, полученными в режиме МС-МС для всех ионов. • Эти значения уже установлены в методе-примере. • Значение, выбранное в поле **Possible m/z (Возможные m/z)**, может зависеть о того, выполняется ли метод сбора данных в режиме высокого разрешения или в режиме удвоенного коэффициента передачи.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии



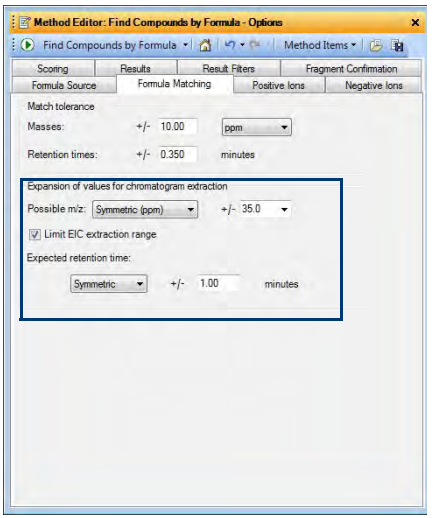


Рис. 41 Вкладка **Formula Source (Источник формулы)** и вкладка **Formula Matching (Сопоставление формул)** в разделе Find by Formula - Options (Найти по формуле — Функции).

h Перейдите на вкладку **Results (Результаты)**.

i Отметьте **Delete previous compounds (Удалить предыдущие соединения)**.

j Отметьте **Extract EIC (Извлечь EIC)** и **Extract cleaned spectrum (Извлечь очищенный спектр)**.

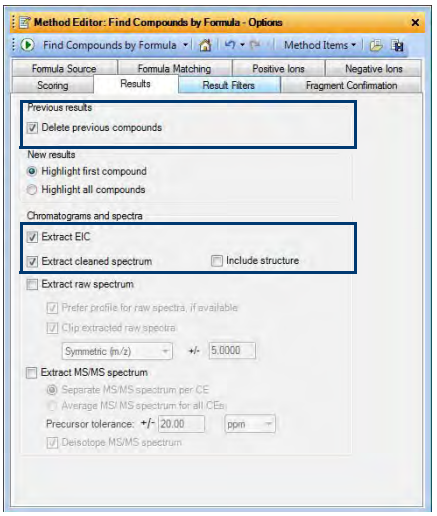
k Перейдите на вкладку **Result Filters (Фильтры результатов)**.

l Поставьте флажок в поле **Only generate compounds for matched formulas (Генерировать соединения только для сопоставленных формул)**.

- Если этого не сделать, то в результатах будут отображаться и необнаруженные соединения.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии



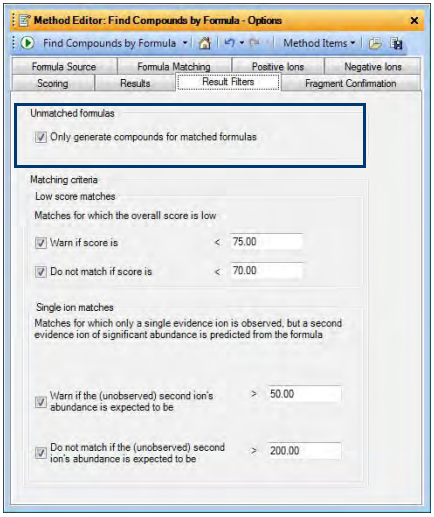


Рис. 42 Вкладка **Results (Результаты)** и вкладка **Result Filters (Фильтры результатов)** в разделе Find by Formula — Options (Найти по формуле — Функции)

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	m Перейдите на вкладку **Fragment Confirmation (Подтверждение фрагмента)**. **n** Отметьте **Confirm with fragment ions (Подтвердить с фрагментными ионами)**. **o** Отметьте **Molecular ion optional (Дополнительные молекулярные ионы)**. **p** Нажмите **Use spectral library only (Использовать только библиотеку спектров)** и укажите значение 7 в поле **Number of most specific ions from spectral library (Количество наиболее специфичных ионов из библиотеки спектров)**. **q** Укажите значение 0,2 в поле **RT difference (Разница ВУ)**.	• Для данных ГХ/Q-TOF поставьте флажок в поле **Molecular ion optional (Дополнительные молекулярные ионы)**. • Большее количество ионов обеспечивает большую специфичность и большую уверенность в результатах; однако большее количество ионов приводит к увеличению времени выполнения программы. • Рекомендуемый диапазон для поля **RT difference (Разница ВУ)** составляет 0,1–0,2. Эта величина представляет собой разницу, допустимую при изменении времени удерживания иона сравнения. Ион сравнения автоматически выбирается программой качественного анализа.
	r Снимите флажок с пункта **S/N ratio (Соотношение сигнал/шум)**. **s** Укажите значение 70 в поле **Coelution score (Степень коэлюирования)**. **t** Щелкните по полю **Minimum number of qualified fragments (Минимальное количество квалифицированных фрагментов)** и укажите значение 1.	• Если поле **S/N ratio (Соотношение сигнал/шум)** отмечено флажком, то есть большая вероятность получения ложноотрицательных результатов (если соотношение слишком низкое). • Рекомендуемое начальное значение находится в промежутке между 1 и 3. Установка значения 1 требует двух квалифицированных фрагментов: иона сравнения и квалифицированного иона.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

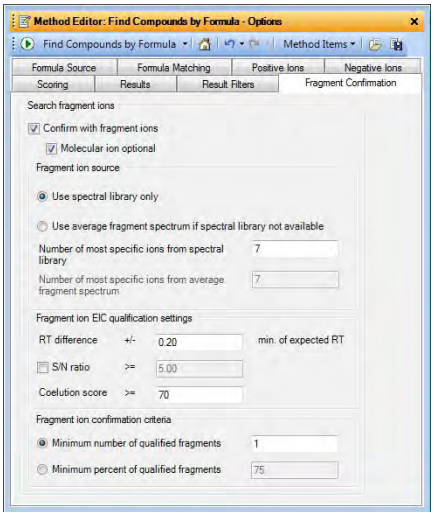
Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
		

Рис. 43 Вкладка **Fragment Confirmation (Подтверждение фрагмента)** в разделе Find by Formula — options (Найти по формуле — Функции)

6 Запустите алгоритм Find Compounds by Formula (Поиск соединений по формуле).	• Щелкните для запуска алгоритма **Find Compounds by Formula (Поиск соединений по формуле)** в файле данных. • Щелкните **Find (Поиск) > Find Compounds by Formula (Поиск соединений по формуле)**.	• Программа качественного анализа (Qualitative Analysis) найдет пять соединений, удовлетворяющих значениям параметров. • Менять значения в остальных вкладках не надо.
7 Сохраните метод.	• Сохраните метод одним из трех способов: ◦ Щелкните значок **Save Method (Сохранить метод)** в редакторе методов (Method Editor). ◦ Щелкните правой кнопкой мыши на редакторе методов (Method Editor) и выберите **Save Method (Сохранить метод)**. ◦ В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save (Сохранить)**.	

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
8 Изучите соединения. См. Рис. 36 на стр. 73.	**a** Щелкните Compound Details View на главной панели инструментов. **b** Закройте окна **Method Editor (Редактор методов)** и **Method Explorer (Обозреватель методов)**, если они отображаются. **c** В окне Compound List (Список соединений) щелкните правой кнопкой мыши по заголовку столбца, который необходимо удалить, и нажмите Remove Column (Удалить столбец). **d** Перетащите столбец **Flags (Tgt) (Флажки (Tgt)** в окно Compound List (Список соединений), так, чтобы он располагался рядом со столбцом **Label (Подпись)**.	• Выбор соединения из окна списка соединений отображает результаты в других окнах этого представления. • Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help). • Два окна показаны более подробно.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

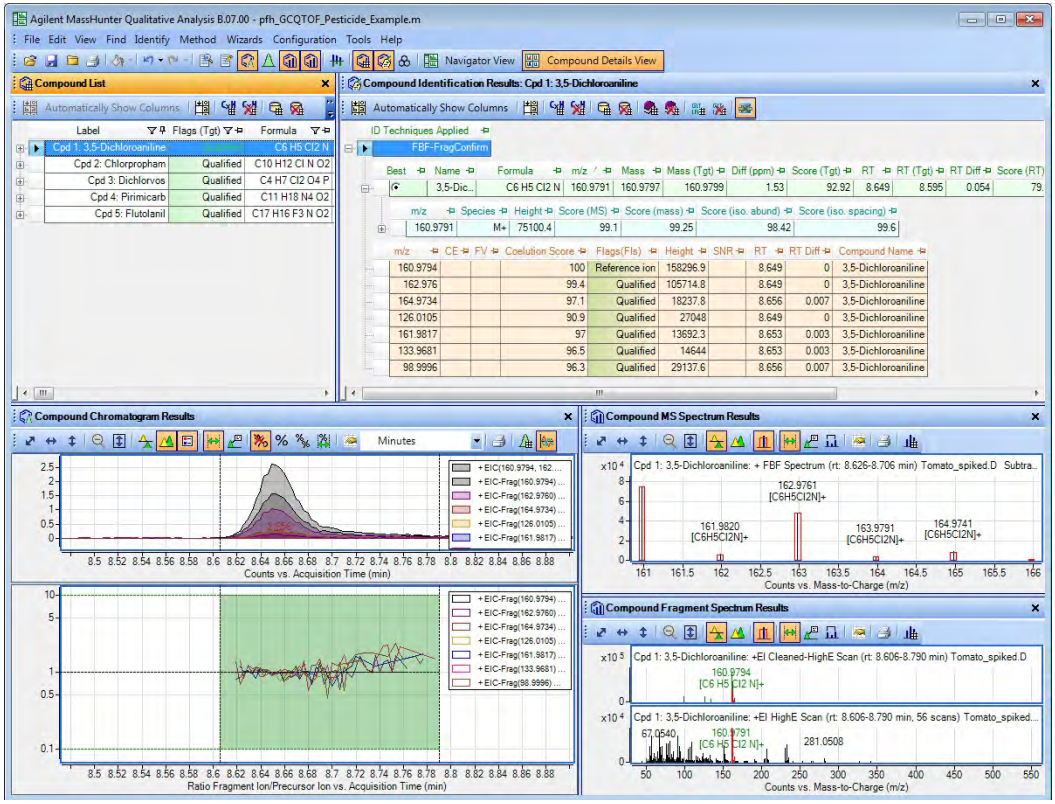


Рис. 44 Результаты Find by Formula (Найти по формуле), включая результаты Fragment Confirmation (Подтверждение фрагмента)

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	e Для изменения соединений в списке для их поочередного просмотра щелкните мышью или воспользуйтесь клавишами со стрелками. **f** Просмотрите информацию в окне результатов определения соединений (Compound Identification Results). **g** Нажмите на значок + для расширения уровня таблицы. После расширения уровня таблицы значок изменится на -.	• Первый уровень таблицы показывает краткую информацию по всем выполняемым идентификационным алгоритмам. • Второй уровень (синий) показывает отдельные значения, использованные для получения общего значения. Эта строка присутствует только в случае нахождения молекулярного иона и отражает результаты поиска по формуле. • Таблица внизу показывает фрагментные ионы и их степени коэлюирования. Она также несет в себе информацию о квалификации фрагмента.

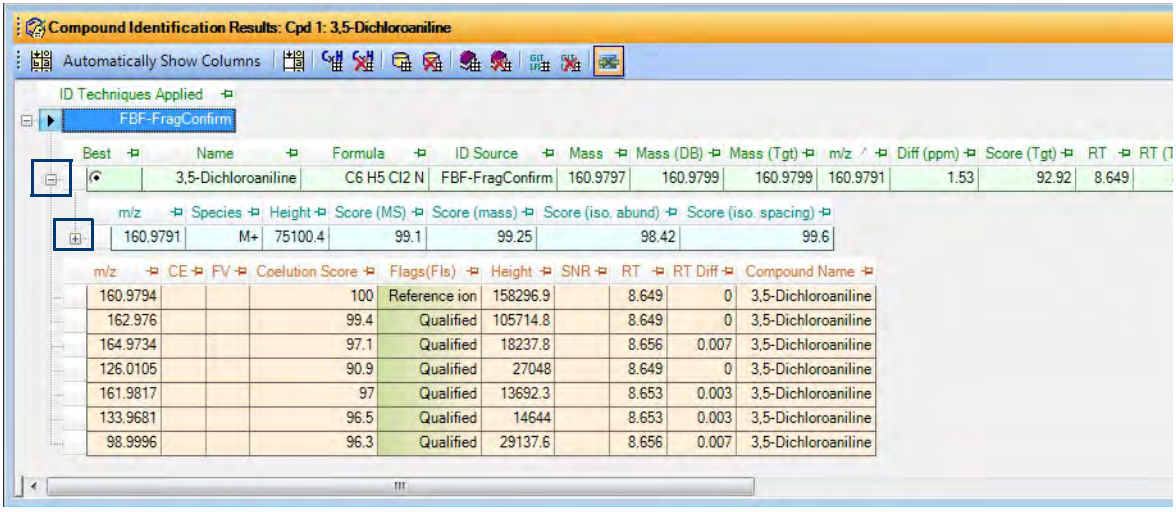


Рис. 45 Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений)

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
	h Просмотрите результаты в окне результатов Compound Chromatogram (Хроматограмма соединения). **i** Убедитесь, что отображается панель Coelution Plot (График коэлюирования). **j** Убедитесь, что выполнено наложение хроматограмм. Значки на панели инструментов расположены в следующем порядке: 	• В окне Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения) отображаются отдельные графики по ионам для каждого фрагментного иона. • В нем также отображается график коэлюирования, который показывает, насколько близко фрагментные ионы коэлюируют с соединением. Для справки представлена черная линия, показывающая значение y, равное 1. Значение 1 показывает, что квалификационные ионы коэлюируют вместе с хроматограммой иона сравнения. При приближении соотношения к 1 происходит более близкое коэлюирование с ионом сравнения.

Задание 16. Найти соединение по формуле с подтверждением фрагмента

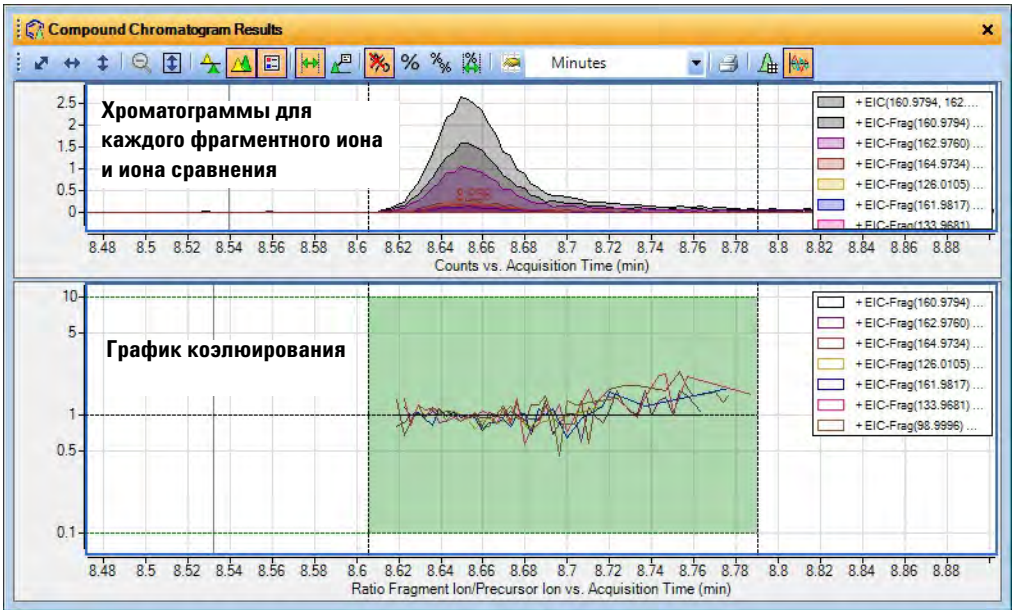
Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
		

Рис. 46 Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений)

9 Закройте файл данных.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.	• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

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

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте TIC для файла данных **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• Если пункт **Load result data (Загрузить результаты)** недоступен, это значит, что результаты не были сохранены в файле данных. См. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98 для получения инструкций по сохранению результатов. • Общий рабочий процесс загружен.
2 Интегрирование и извлечение спектров пиков.	**a** Щелкните Chromatograms (Хроматограммы) > Раздел интегрирования (MC) в окне обозревателя методов (Method Explorer). **b** Перейдите на вкладку **Peak Filters (Фильтры пиков)**. **c** Нажмите кнопку **Peak height (Высота пика)**. **d** Отметьте пункт **Relative height (Относительная высота)**. **e** Отметьте пункт **Limit (by height) to the largest (Ограничить (по высоте) до максимум)** и введите значение 4. **f** Выберите пункты **Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)**.	

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
3 Генерация формул для каждого спектра пиков. • Просмотр списка результатов определения спектра. • Закройте окно результатов спектра MC (MS Spectrum Results). Подсказка. Для получения таких же результатов, как в Рис. 48, убедитесь, что для изотопной модели выбрано значение **Common organic molecules (Простые органические молекулы)**.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) щелкните **Identify Compounds (Определить соединения) > Generate Formulas (Создать формулы)**. **b** В окне редактора методов (Method Editor) перейдите на вкладку **Charge State (Зарядовое состояние)**и выберите **Common organic molecules (Простые органические молекулы)** в качестве **изотопной модели**. **c** В окне навигатора по данным (Data Navigator) выделите все спектры в разделе **User Spectra (Пользовательские спектры)**. **d** Щелкните команду **Identify (Определить) > Generate Formulas from Spectrum Peaks (Создать формулы по пикам спектров)** или нажмите кнопку **Generate Formulas from Spectrum Peaks (Создать формулы по пикам спектров)**,  чтобы запустить алгоритм. **e** Если необходимо, щелкните значок Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)  или команду **View (Просмотр) > Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)**. **f** В окне результатов определения спектров (Spectrum Identification Results) нажмите кнопку **Automatically Show Columns (Автоматически показывать столбцы)** на панели инструментов. **g** Щелкните значок Hide Empty Columns (Скрыть пустые столбцы), , в окне результатов определения спектров (Spectrum Identification Results). **h** В окне навигатора по данным выберите спектр около 5,558 минут. **i** Выберите **C6 H7** как **Best (Лучший)** результат. **j** Разверните таблицу для этого ряда. **k** Закройте окно редактора методов (Method Editor). **l** Рассмотрите формулы и типы ионов, которые отобразятся поверх многих пиков в окне результатов спектров MC (MS Spectrum Results). Формулы и типы ионов имеют тот же цвет, что и спектры.	• Прогнозируемое соотношение интенсивностей изотопов можно увидеть на спектральном графике, если увеличить масштаб вблизи соответствующего значения m/z. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help). • Значок Run (Запустить)  на панели инструментов окна редактора методов (Method Editor) иногда позволяет выбрать действие из списка возможных действий. Например, выбор команды Run (Запустить) в этом разделе дает возможность выполнения двух действий. Если щелкнуть стрелку, появится список действий, которые можно выбрать. Выбор нового действия из списка меняет предыдущее действие по умолчанию. Если сразу нажать кнопку Run (Запустить), выполнится действие по умолчанию. • Ширина столбца изменяется путем перетаскивания линии, которая разделяет соседние столбцы. • Столбец можно передвинуть. Для этого перетащите заголовок столбца. • Удалить столбец можно, если щелкнуть **Remove column (Удалить столбец)** в контекстном меню таблицы.

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

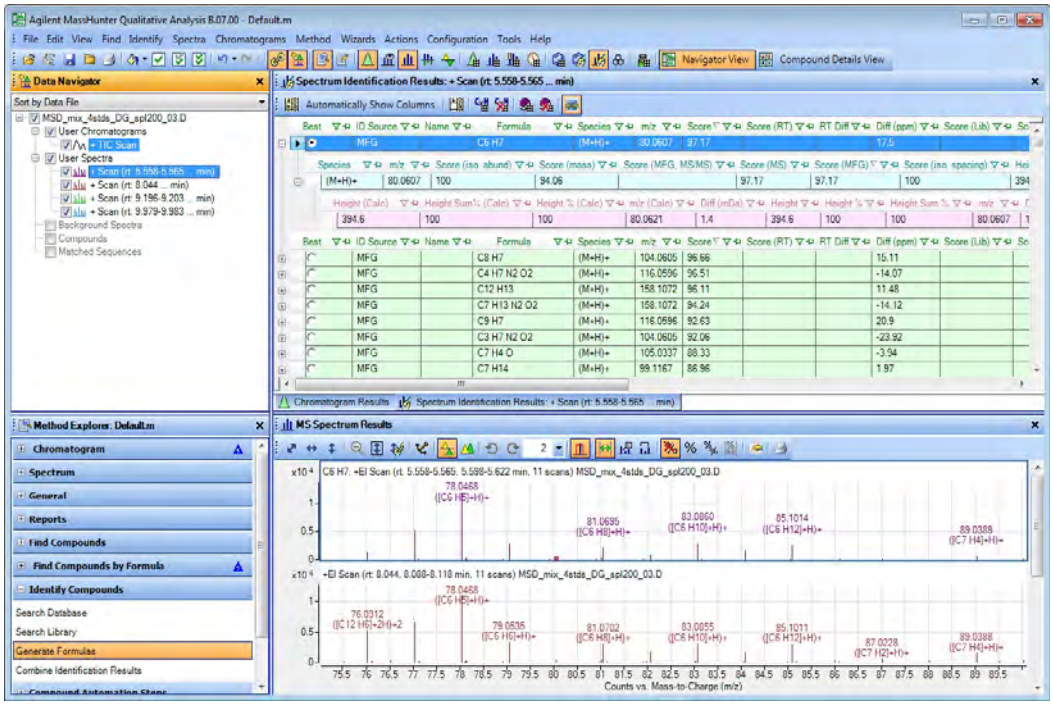


Рис. 47 Создайте результаты формул для пиков 1–4

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
4 Выполните поиск спектров для пиков 1–4 в библиотеке.	**a** В окне навигатора по данным (Data Navigator) щелкните **User Spectra (Пользовательские спектры)**. **b** В окне обозревателя методов (Method Explorer) щелкните **Identify Compounds (Определить соединения) > Search Unit Mass Library (Поиск в библиотеке массовой характеристики пиков)**. **c** Добавьте рабочую библиотеку. Выбрана библиотека GCQTOF_pesticide_matrix_RT.cdb. **d** Укажите значение 50 в поле **Score (rev) (Степень (просм)**. **e** Снимите флажки с полей **Instrument type (Тип прибора)** и **Collision energy (Энергия столкновения)** во вкладке Search Criteria (Критерии поиска). **f** Снимите флажки с полей **Absolute Height (Абсолютная высота)** и **Relative Height (Относительная высота)** во вкладке Peak Filters (Фильтры пиков). **g** Выберите **Identify (Определить) > Search Library for Spectra (Поиск спектров в библиотеке)** в главном меню. **h** Закройте окно редактора методов (Method Editor).	• Реактор методов (Method Editor) открывается автоматически при выборе раздела в обозревателе методов (Method Explorer).

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5 Измените видимые столбцы.	**a** Щелкните правой кнопкой мыши на окне результатов определения спектров (Spectrum Identification Results), а затем щелкните **Add/Remove Columns (Добавить/Удалить столбцы)**. В диалоговом окне «(Enhanced) Add/Remove Columns» («(Расширенные) Добавить/Удалить столбцы»), отметьте столбцы для отображения. Нажмите кнопку **OK**. **b** Закройте окно редактора методов (Method Editor) **c** Щелкните значок Hide Empty Columns (Скрыть пустые столбцы), , в окне результатов определения спектров (Spectrum Identification Results). **d** Рассмотрите формулы и типы ионов, которые отобразятся поверх каждого пика в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results).	• При удалении столбца, который содержит данные, с помощью команды **Remove Column (Удалить столбец)**, программа автоматически отобразит этот столбец, если включена функция Automatically Show Columns (Автоматически показывать столбцы). • Алгоритм LibSearch имеет большой вес в разделе комбинирования результатов определения (Combine Identification Results) этого метода. Можно вручную выбрать лучший результат MFG или изменить метод комбинирования результатов определения.

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

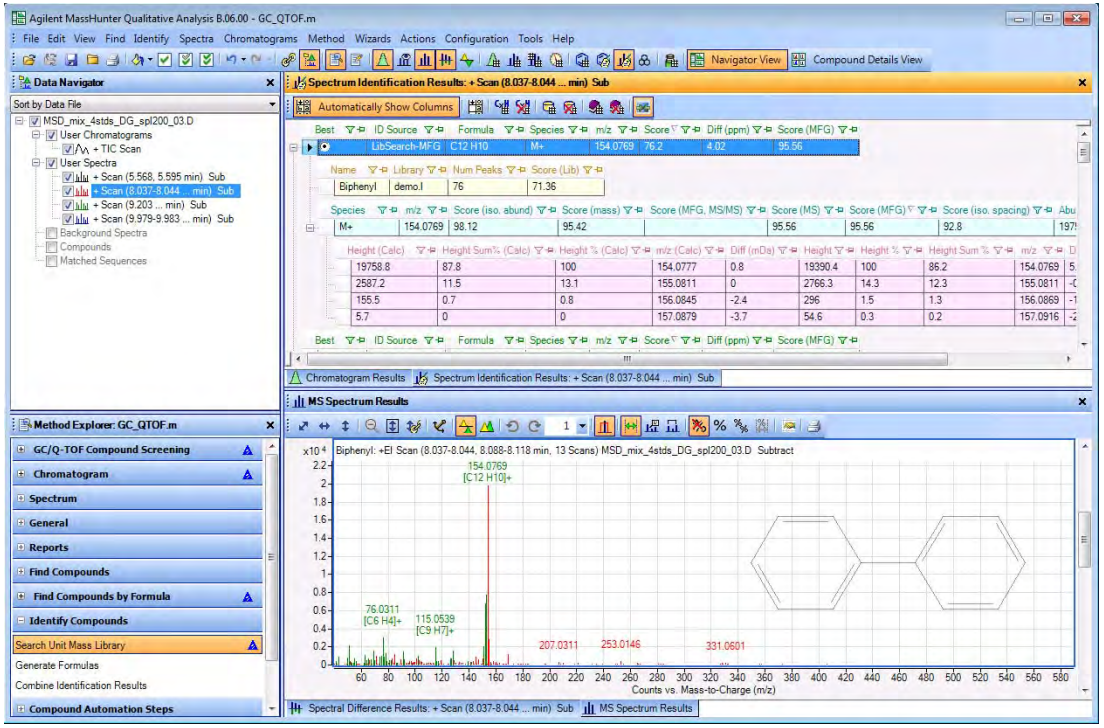


Рис. 48 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

Задание 17. Создайте формулы и выполните поиск спектров пиков в библиотеке

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
6 Рассмотрите результаты для каждого спектра в окне пиков МС (MS Peaks One).	**a** Щелкните **View (Просмотр) > MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 спектров пиков МС)**. **b** Щелкните правой кнопкой мыши, а затем выберите Add/Remove Columns (Добавить/Удалить столбцы). **c** Убедитесь, что столбцы, отображенные в Рис. 49, также присутствуют в списке **Show these columns (Показать эти столбцы)**. **d** Выполните сортировку по столбцу **Ion Type (Тип ионов)**. **e** Если тип ионов - фрагмент (Fragment Ion), формулы и типы ионов отображаются зеленым цветом на каждом пике в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results).	• Фрагментные ионы отображаются зеленым цветом в окне результатов спектров МС (MS Spectrum Results). • Поле типа ионов (**Ion Type**) может иметь значения: молекулярный (Molecular Ion), фрагмент (Fragment Ion) или быть пустым. В случае фрагментных ионов (Fragment Ion) в столбце формулы потерь (Loss Formula) и массы потерь (Loss Mass) отображаются формула и масса, необходимые для получения такого иона из молекулярного иона. «Формулы и типы ионов» отображает информацию для этого иона.

MS Peaks One: + Scan (8.037-8.044 ... min) Sub

m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion
155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion
156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion
62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

Рис. 49 Таблица 1 пиков МС (MS Peaks One) содержит столбцы: **Ion Type (Тип ионов)**, **Loss Formula (Формула потерь)**, **Loss Mass (Масса потерь)**, и **Formula & Ion Species (Формулы и типы ионов)**

7 (необязательно) Закройте файл данных. • Чтобы узнать, как сохранять результаты, перейдите к следующему заданию.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Щелкните **Close (Закрыть)**.	• Чтобы узнать, как сохранить результаты, см. «Задание 18. Сохраните результаты» на стр. 98.

Задание 18. Сохраните результаты

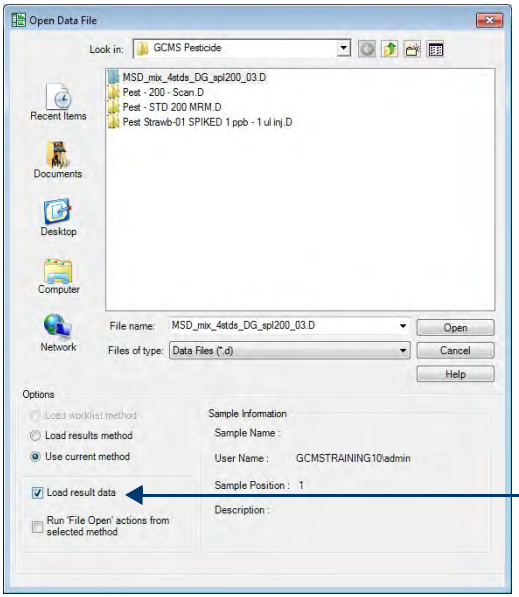
В процессе выполнения этого задания будет осуществляться сохранение результатов для текущего файла данных.

Задание 18. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Сохраните результаты для текущего файла данных и закройте его.	**a** Щелкните **File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты)**. **b** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**.	• Имея один файл данных можно сохранить только один набор результатов. При повторном сохранении результатов с помощью команды **File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты)** для текущего файла данных, новые данные будут записаны поверх данных предыдущего сохранения.
2 Откройте файл данных и загрузите результаты.	**a** Щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. Откроется диалоговое окно Open Data File (Открыть файл данных). **b** Выберите файл данных. Для этого примера выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. **c** Отметьте пункт **Load result data (Загрузить данные результатов)**. **d** Нажмите кнопку **Open (Открыть)**.	

Задание 18. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии



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

Рис. 50 Откройте диалоговое окно Open Data File (Открыть файл данных)

3 Изучите результаты.

a Щелкните на окне **результатов определения спектров (Spectrum Identification Results)**.

b Рассмотрите результаты.

Задание 18. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

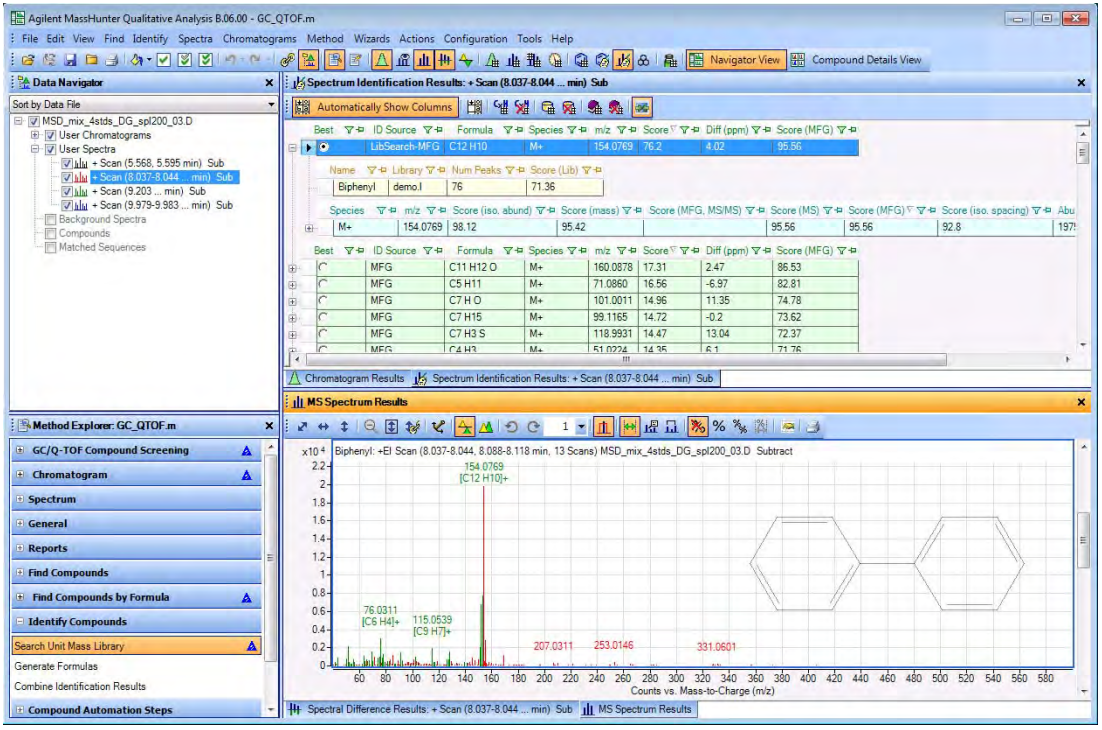


Рис. 51 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

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

Задание 18. Сохраните результаты

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
5 Снова откройте файл данных, но не загружайте результаты.	**a** Щелкните **File (Файл) > Open (Открыть)**. Откроется диалоговое окно **Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных. Для этого примера выберите файл данных MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)**. **d** Нажмите кнопку **Open (Открыть)**.	• Если не загружать результаты, при открытии файла данных по умолчанию откроется TIC. Если в поле запуска выбранного метода поставить отметку для открытия файла (File Open), выполнится открытие файла. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

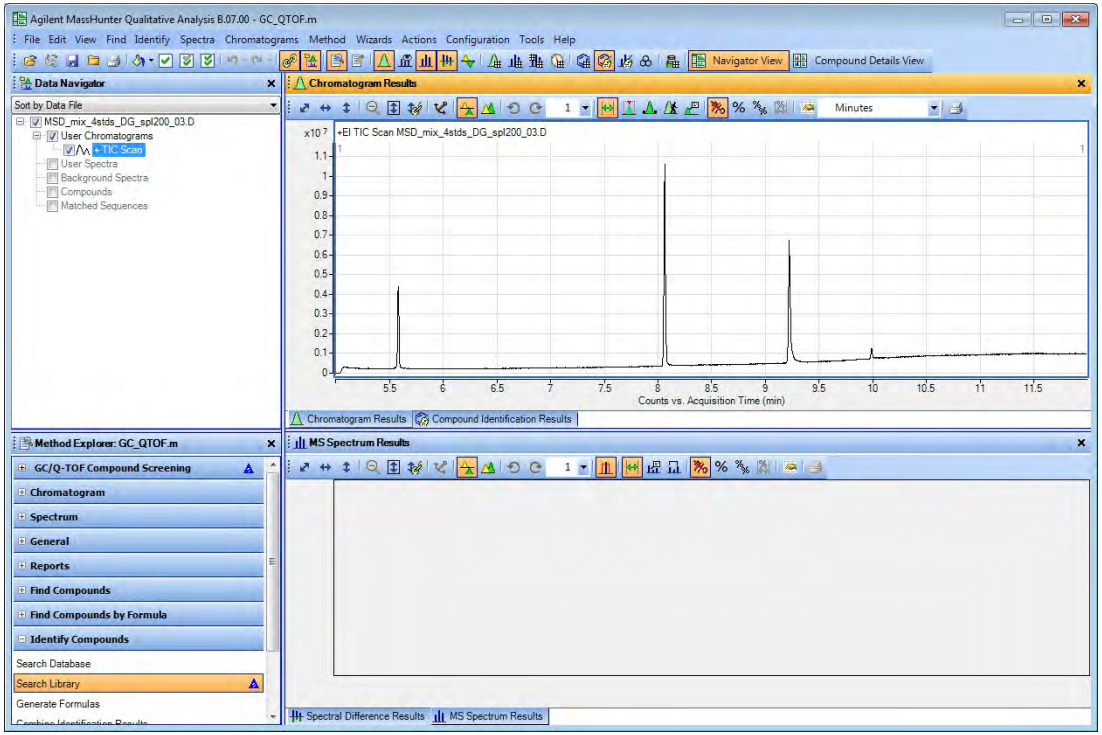


Рис. 52 Результаты поиска в библиотеке (Library Search) и генерации формул (Generate Formulas) для спектров первого пика

6 Закройте файл данных.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Щелкните **No (Нет)**.	

Упражнение 3
Использование рабочих процессов, экспорт и печать

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса 104
Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF 111
Задание 21. Экспортируйте файл CEF 116
Задание 22. Печать отчета об анализе 118
Задание 23. Печать отчета по соединениям 123

В этих заданиях вы научитесь настраивать и выполнять метод качественного анализа. Затем вы выполните операции в рамках автоматизированного метода при открытии файла данных.

Для этих примеров используются два различных рабочих процесса. Для получения дополнительной информации см. «Рабочие процессы» на стр. 141.

Общий рабочий процесс поддерживает данные ГХ/QQQ, ГХ/Q-TOF и ЖХ/МС. Рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow) поддерживает данные ГХ/Q-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 вы найдете советы и дополнительную информацию о каждом этапе упражнения.

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

При первом использовании программы Программа качественного анализа загружается метод default.m. Вы можете внести изменения в открытый метод и сохранить его или открыть новый метод, внести изменения и сохранить этот метод. Вы не можете перезаписать метод default.m.

Вы также можете настроить выполнение определенных действий в методе при открытии файла данных. При открытии файла данных вы также можете загрузить метод, который был использован для создания результатов, которые хранятся в файле данных. Этот метод автоматически сохраняется каждый раз, когда вы сохраняете результаты с файлом данных. Общий рабочий процесс может быть использован как с файлами данных ГХ/МС, так и ЖХ/МС.

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **Pest - STD 200 MRM.d**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **Pest - STD 200 MRM.d** в папке образцов файлов данных **GCMS Pesticides (Пестициды ГХ/МС)**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	• При работе с данными ГХ/МС используйте общий рабочий процесс (General Workflow) или рабочий процесс скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow).
2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	• Для этого образца выберите общий рабочий процесс (General workflow).

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Настройте метод на извлечение хроматограммы TIC. • Определите хроматограмму TIC для данных MC-MC.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Chromatogram (Хроматограмма) > Define Chromatograms (Определить хроматограммы)**. **b** Удалите хроматограмму **BPC** из списка **Defined chromatograms (Определенные хроматограммы)**. **c** Выберите **TIC (хроматограмма полного ионного тока)** в поле **Type (Тип)**. **d** Убедитесь, что уровень MC установлен на **MC/MC**. **e** Щелкните **Add (Добавить)**.	
4 Выберите метод для интегрирования данных. • Установите предел интегрирования до четырех наивысших пиков.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (MC-MC)**. **b** Перейдите на вкладку **Peak Filters (Фильтры пиков)**. **c** В разделе «Максимальное количество пиков» (Maximum number of peaks) отметьте пункт **Limit (by height) to the largest (Ограничить (по высоте) до максимальных)**. **d** Введите 4.	• Обновление значения во вкладке «Фильтры пиков» (Peak Filters) в разделе хроматограммы (Chromatogram) > Integrate (MS) (Интегрировать (MC) также обновит значения в других разделах обозревателя метода (Method Explorer). Для выделения этих других разделов появляются голубые треугольники.

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

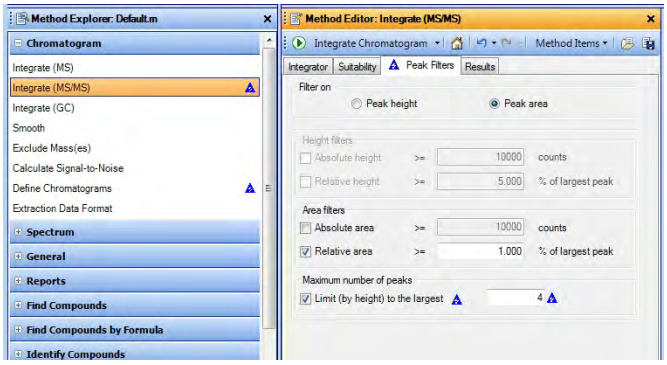
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		**Вы можете щелкнуть значок «Сохранить метод» (Save Method), чтобы сохранить текущий метод.**

Рис. 53 Вкладка Chromatogram (Хроматограмма) > Integrate (MS/MS) (Интегрировать (MC-MC)) > Peak Filters (Фильтры пиков)

5 Проверьте интегрирование, чтобы убедиться, что появятся только 4 пика.	• Щелкните значок **Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)** , чтобы интегрировать файл данных.	
6 Сохраните метод в *iii*_GCexercise1, где «*iii*» — ваши инициалы.	**a** В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save As (Сохранить как)**. **b** Укажите название **iii_GCexercise1**. **c** Нажмите кнопку **Save (Сохранить)**.	• Обратите внимание, что сохранение метода приведет к тому, что исчезнут все голубые треугольники, означающие изменение значений в открытом методе.
7 Измените фоновый спектр пика, чтобы использовать спектр в начале пика.	**a** В обозревателе методов (Method Explorer) щелкните **Spectrum (Спектр) > Extract (MS/MS) (Извлечь (MC-MC)**. **b** Щелкните **Peak Spectrum Extraction (MS/MS) (Извлечение спектра пика (MC-MC)**. **c** Для фонового спектра пика выберите **Spectrum at peak start** (Спектр на начале пика).	• Если вы внесете дополнительные изменения после сохранения метода, появятся голубые треугольники.

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

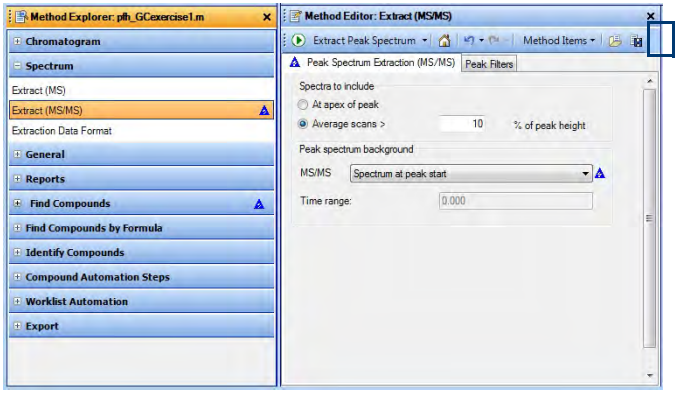
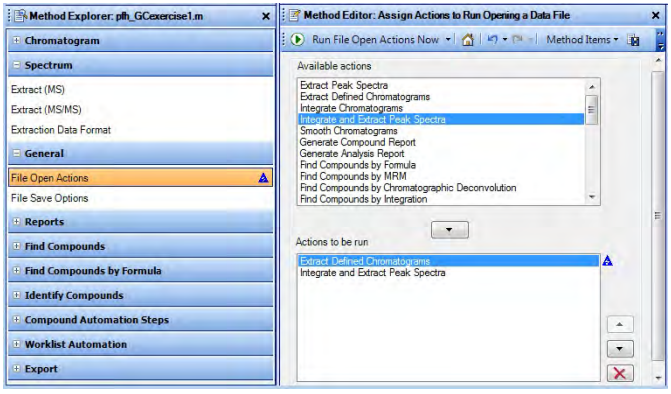
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		**Вы можете щелкнуть значок «Сохранить метод» (Save Method), чтобы сохранить текущий метод.**

Рис. 54 Вкладка The Spectrum (Спектр) > Extract (MS/MS) (Извлечь (МС-МС) > Peak Spectrum Extraction (MS/MS) (Извлечение спектра пика (МС-МС)

8 Проверьте извлечение спектра МС, чтобы убедиться, что фоновый спектр вычитается.	• Щелкните значок **Extract Peak Spectrum (Извлечь спектр пика)**, чтобы запустить действие на выбранном пике в файле данных.	
9 Сохраните метод.	• Сохраните метод одним из трех способов: ◦ Щелкните значок **Save Method (Сохранить метод)** в редакторе методов (Method Editor). ◦ Щелкните правой кнопкой мыши на редакторе методов (Method Editor) и выберите **Save Method (Сохранить метод)**. ◦ В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save (Сохранить)**.	• Значок «Сохранить метод» (Save Method) показан в Рис. 54 на стр. 107

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
10 Настройте метод на автоматическое выполнение действий, параметры которых вы только что изменили при открытии файла данных. • Перечислите действия, которые должны быть выполнены при открытии этого или другого файла данных. Подсказка. Смотри под Общие (General) в обозревателе методов (Method Explorer).	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **General (Общие) > File Open Actions (Действия при открытии файла)**. **b** Выберите **Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)** из списка **Available actions (Доступные действия)**. **c** Нажмите кнопку **Add (Добавить)**, , чтобы переместить выбранное действие в список **Actions to be run (Действия к выполнению)**. Вы также можете щелкнуть два раза на выбранном действии, чтобы переместить его в другой список.	• Действие Extract Defined Chromatograms (Извлечение определенных хроматограмм) по умолчанию находится в списке действий, которые необходимо выполнить. Это действие должно стоять первым в списке, потому что необходимо сначала извлечь хроматограммы, после чего можно выполнить интегрирование и извлечение спектров пиков.
11 Проверьте действия при открытии файла (File Open Actions).	• Щелкните значок **Run File Open Actions Now (Выполнить действия при открытии файла сейчас)** , чтобы выполнить действия над файлом данных.	• Хроматограммы и спектры не будут перезаписаны. Будут добавлены новые хроматограммы и спектры.



Частью списка действий к выполнению (Actions to be run) являются два различных действия. Первое действие — извлечение определенных хроматограмм. Затем эта хроматограмм интегрируется и извлекаются пики.

Рис. 55 Раздел General (Общие) > File Open Actions (Действия при открытии файла) в редакторе методов (Method Editor)

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
12 Сохраните метод.	• Щелкните значок **Save Method (Сохранить метод)** в окне редактора методов (Method Editor),	
13 настройте метод на автоматические действия при исполнении метода в ходе выполнения рабочей таблицы. • Перечислите действия, которые должны быть выполнены при открытии этого или другого файла данных. Подсказка. Смотрите в окне обозревателя методов (Method Explorer) под «Автоматизация рабочей таблицы» (Worklist Automation)	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Worklist Automation (Автоматизация рабочей таблицы) > Worklist Actions (Действия рабочей таблицы)**. **b** Удалите **Generate Analysis Report (Создать отчет по результатам анализа)** из списка **Actions to be run (Действия к выполнению)**.	
14 Проверьте действия рабочей таблицы.	• Щелкните значок **Run Worklist Actions Now (Выполнить действия рабочей таблицы сейчас)** , чтобы выполнить действия над файлом данных.	• Хроматограммы и спектры не будут перезаписаны. Будут добавлены новые хроматограммы и спектры.

Задание 19. Настройка и выполнение метода качественного анализа с использованием общего рабочего процесса

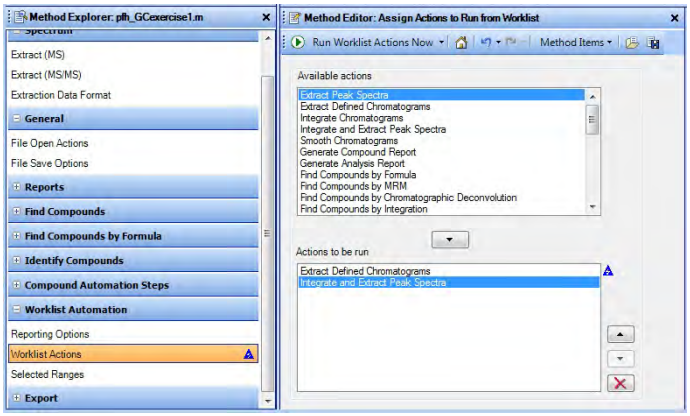
Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
		**В метод включены два различных списка действий. Первый список действий (File Open Actions (Действия при открытии файла)) может быть выполнен при открытии файла данных. Второй список действий (Worklist Actions (Действия рабочей таблицы)) выполняется при запуске метода.**

Рис. 56 Раздел Worklist Automation (Автоматизация рабочей таблицы) > Worklist Actions (Действия рабочей таблицы) в редакторе методов (Method Editor)

15 Сохраните метод и закройте файл данных без сохранения результатов.

a Щелкните значок **Save Method (Сохранить метод)** в редакторе методов (Method Editor),

b Щелкните **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)** и ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

В этом задании вы настроите метод качественного анализа, содержащий список действий анализа, которые необходимо выполнить в определенном порядке. Они включают извлечение и интегрирование хроматограмм, извлечение спектров, поиск по библиотеке спектров пиков, создание формул для спектров и распечатку отчета по результатам анализа.

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте хроматограмму полного ионного тока (TIC) для файла данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d**.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)** и нажмите **Open (Открыть)**.	
2 Настройте интерфейс пользователя для работы с данными ГХ.	• Следуйте инструкциям, описанным в «Задание 2. Настройка интерфейса пользователя для работы с данными ГХ/МС» на стр. 13.	• Для этого образца выберите рабочий процесс скрининга соединений (Compound Screening workflow) ГХ/Q-TOF.

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Убедитесь, что хроматограмма полного ионного тока (TIC) извлечена.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Chromatogram (Хроматограмма)**. **b** Выберите раздел **Define Chromatograms (Определить хроматограммы)**. **c** В окне редактора методов (Method Editor) убедитесь, что выбранная хроматограмма в разделе **Defined chromatograms (Определенные хроматограммы)** — хроматограмма полного ионного тока (TIC). Если нет, выберите **TIC (хроматограмма полного ионного тока)** в поле **Type (Тип)**. Нажмите кнопку **Change (Изменить)**.	•
4 Проверьте параметры алгоритма поиска по деконволюции хроматограммы (Find by Chromatogram Deconvolution).	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите раздел **GC/Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХQ-TOF) > Find by Chromatogram Deconvolution (Поиск по деконволюции хроматограммы)**. **b** Выберите вкладку **Mass Filter (Фильтр масс)**. **c** Установите значение **Absolute height (Абсолютная высота)** на `13000`. **d** Перейдите на вкладку **Results (Результаты)**. **e** Нажмите клавишу **Highlight all compounds (Выделить все соединения)**. **f** Проверьте результаты на каждой вкладке.	• Просмотрите разделы для рабочего процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening workflow). • Обратите внимание, что для этого процесса существует шесть разделов. Все эти разделы — копии разделов, которые уже являются частью обозревателя методов. • Обратите внимание, что голубые треугольники появляются в других разделах обозревателя методов (Method Explorer). Они означают, что те же значения параметров были изменены также где-то в другом месте.

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
5 Проверьте параметры для определения с помощью алгоритма поиска в библиотеках (Identify by Library Search).	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите раздел **GC/Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХ/Q-TOF) > Identify by library search (Определить с помощью поиска в библиотеках)**. **b** Нажмите кнопку **Add Library (Добавить библиотеку)**. Выберите библиотеку и щелкните **Open (Открыть)**. **c** (дополнительно) Если вы не хотите использовать библиотеку, нажмите кнопку **Remove Library (Удалить библиотеку)**, чтобы удалить ее. **d** Проверьте параметры на каждой вкладке.	• Библиотека demo.l установлена в папке \MassHunter\Library. • В эту папку также можно установить NIST11.l (или другую версию библиотеки NIST).
6 Сохраните метод в *iii*_GCexercise2, где «*iii*» — ваши инициалы.	**a** В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save As (Сохранить как)**. **b** Укажите название **iii_GCexercise2**. **c** Нажмите кнопку **Save (Сохранить)**.	
7 Настройте метод на автоматическое выполнение действий при открытии файла данных. • Перечислите действия, которые должны быть выполнены при открытии этого или другого файла данных. Подсказка. См. в окне обозревателя методов (Method Explorer) под Общие (General)	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **General (Общие) > File Open Actions (Действия при открытии файла)**. **b** Удалите все действия из списка **Actions to be run (Действия к выполнению)**. **c** Добавьте **Extract Defined Chromatograms (Извлечь определенные хроматограммы)**. **d** Добавьте **Find Compounds by Chromatographic Deconvolution (Найти соединения по хроматографической деконволюции)**. **e** Добавьте **Search Library for Compounds (Поиск соединений по библиотеке)**.	

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
8 Проверьте действия при открытии файла (File Open Actions).	• Щелкните значок **Run File Open Actions Now (Выполнить действия при открытии файла сейчас)**, чтобы выполнить действия над файлом данных.	• Хроматограммы и спектры не будут перезаписаны. Будут добавлены новые хроматограммы и спектры.

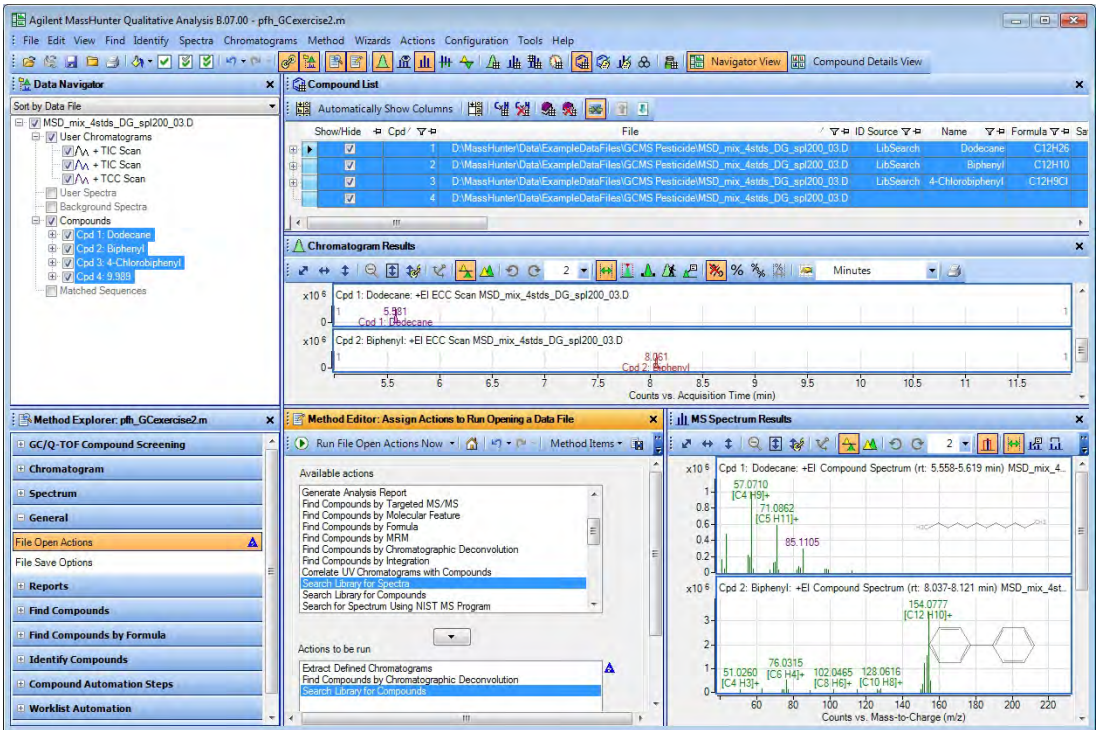


Рис. 57 Результаты выполнения действий рабочей таблицы над данными ГХ/Q-TOF

Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
9 Сохраните метод в *iii*_GCexercise2, где «*iii*» — ваши инициалы.	• Сохраните метод одним из трех способов:  Щелкните значок **Save Method (Сохранить метод)** в редакторе методов (Method Editor). • Щелкните правой кнопкой мыши на редакторе методов (Method Editor) и выберите **Save Method (Сохранить метод)**. • В верхнем меню выберите **Method (Метод) > Save (Сохранить)**.	• Если этот метод выполняется в течение рабочей таблицы сбора данных, действия рабочей таблицы на этой вкладке выполняются в данном порядке.
10 Закройте файл данных без сохранения результатов.	**a** Нажмите **File (Файл) > Close Data File (Закрыть файл данных)**. **b** Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.	

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Вы можете экспортировать файл CEF, который содержит информацию о соединениях. Этот файл CEF может быть импортирован в другие программы, например, MassHunter Quantitative Analysis и Mass Profiler Professional. Вы также можете импортировать соединения, которые были экспортированы в файл CEF.

Задание 21. Экспортируйте файл CEF

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Откройте файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** и выполните действия при открытии файла (File Open) для метода iii_GCexercise2.m, который был создан в «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)**. **d** Отметьте пункт **Run 'File Open' actions from selected method (Выполнить действия при открытии файла из выбранного метода)**. **e** Нажмите кнопку **Use current method (Использовать текущий метод)** и щелкните **Open (Открыть)**.	• После выполнения «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111 текущим методом будет iii_GCexercise2.m. Этот метод настроен на выполнение алгоритма поиска соединений по деконволюции хроматограммы (Find Compounds by Chromatogram Deconvolution) и затем на выполнение алгоритма поиска по библиотекам для каждого соединения.
2 Экспортируйте файл CEF.	**a** Чтобы экспортировать файл, щелкните **File (Файл) > Export (Экспортировать) > as CEF (как CEF).** **b** Нажмите кнопку **All results (Все результаты)**. **c** Выберите местоположение для экспортируемого файла. **d** Нажмите кнопку **OK**.	• Файл CEF будет использован для экспорта соединений.

Задание 21. Экспортируйте файл CEF (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

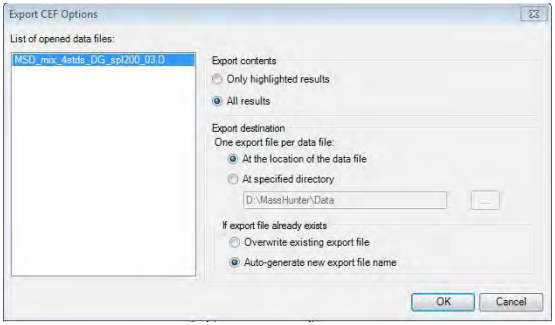


Рис. 58 Диалоговое окно Export CEF Options (Параметры экспорта CEF)

Задание 22. Печать отчета об анализе

Если вы захотите распечатать отчет о результатах анализа после выполнения любого задания в этом или следующем упражнении, используйте эти инструкции.

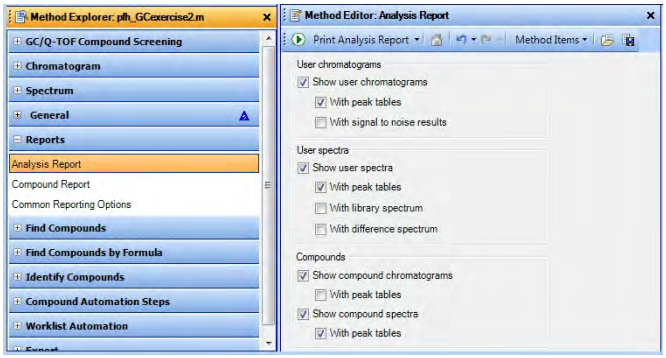
Отчет о результатах анализа может включать результаты извлечения и интегрирования хроматограмм, извлечения спектров, поиска соединений, поиска баз данных для спектров пиков или создания формул из спектров пиков.

Задание 22. Печать отчета об анализе

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
1 Если файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** не загружен, откройте этот файл данных и выполните действия при открытии файла (File Open) для метода iii_GCexercise2.m, который был создан в «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)**. **d** Отметьте пункт **Run 'File Open' actions from selected method (Выполнить действия при открытии файла из выбранного метода)**. **e** Нажмите кнопку **Use current method (Использовать текущий метод)** и щелкните **Open (Открыть)**.	• После выполнения «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111 текущим методом будет iii_GCexercise2.m. Этот метод настроен на выполнение алгоритма поиска соединений по деконволюции хроматограммы (Find Compounds by Chromatogram Deconvolution) и затем на выполнение алгоритма поиска по библиотекам для каждого соединения.

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
2 Измените выбранные элементы для отчета о результатах анализа в методе: • Отметьте хроматограммы, спектры или таблицы, которые вы хотите распечатать. • Снимите отметки с хроматограмм, спектров или таблиц, которые вы не хотите печатать.	**a** В окне обозревателя методов (Method Explorer) выберите **Reports (Отчеты) > Analysis Report (Отчет о результатах анализа)**. **b** Отметьте все дополнительные разделы, которые вы хотите распечатать. **c** Снимите флажки с полей, которые вы не хотите печатать.	• Отчет о результатах анализа будет содержать только ту информацию, которую вы отметите в этом разделе. • Если некоторые результаты недоступны, значит эти результаты не включены, даже если они отмечены в этом разделе. Например, если вы не интегрировали хроматограмму, таблица пиков не будет включена.



По умолчанию окно редактора методов (Method Editor) является плавающим. Вы видите его как отдельное от остальной части программы качественного анализа окно. Чтобы закрепить окно, щелкните правой кнопкой мыши на заголовке окна и нажмите Floating (Плавающее). Вы также можете дважды щелкнуть на панели заголовка окна, чтобы закрепить его.

Рис. 59 Раздел отчета о результатах анализа (Analysis Report) в окнах обозревателя методов (Method Explorer) и редактора методов (Method Editor)

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии
3 Распечатайте отчет.	**a** Вы можете распечатать отчет различными способами: • В главном меню выберите **File (Файл) > Print (Печать) > Analysis Report (Отчет о результатах анализа).** • На главной панели инструментов щелкните значок принтера (Printer). • Щелкните значок **Print Analysis Report (Печатать отчет по результатам анализа)**  на панели инструментов редактора методов (Method Editor) при выбранном разделе отчета о результатах анализа (Analysis Report). • В редакторе методов (Method Editor) щелкните правой кнопкой мыши раздел отчета о результатах анализа (Analysis Report) и выберите **Print Analysis Report (Печатать отчет о результатах анализа)**. • В контекстном меню файла данных в навигаторе по данным (Data Navigator) щелкните **Analysis Report (Отчет о результатах анализа)**. **b** Щелкните один из вариантов под заголовком **Report contents (Содержание отчета)**. **c** (дополнительно) Поставьте флажок в поле **Separate report per data file (Разделить отчет по файлам данных)**. **d** Отметьте пункт **Print report (Печатать отчет)** и выберите принтер. **e** Отметьте пункт **Print preview (Просмотр документа)**. **f** Нажмите кнопку **OK**.	• Значок Run (Выполнить)  на панели инструментов окна редактора методов (Method Editor) иногда позволяет выбрать действие из списка возможных действий. Например, если в окне редактора методов (Method Editor) вы переключитесь в раздел Reports (Отчеты) > Common Reporting Options (Общие параметры отчетов), после нажатия кнопки Run (Выполнить) вам станут доступны четыре различных действия. Если щелкнуть стрелку, появится список действий, которые можно выбрать. Выбор нового действия из списка меняет предыдущее действие по умолчанию. Если сразу нажать кнопку Run (Выполнить), будет выполнено текущее действие по умолчанию.

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

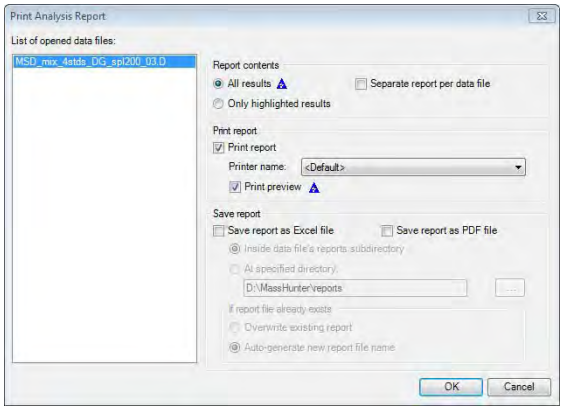


Рис. 60 Диалоговое окно Print Analysis Report (Печатать отчет о результатах анализа)

g Просмотрите отчет.

h Щелкните значок **Close Print Preview (Закрыть просмотр документа)** на панели инструментов.

Задание 22. Печать отчета об анализе (продолжение)

Шаги	Подробные инструкции	Комментарии

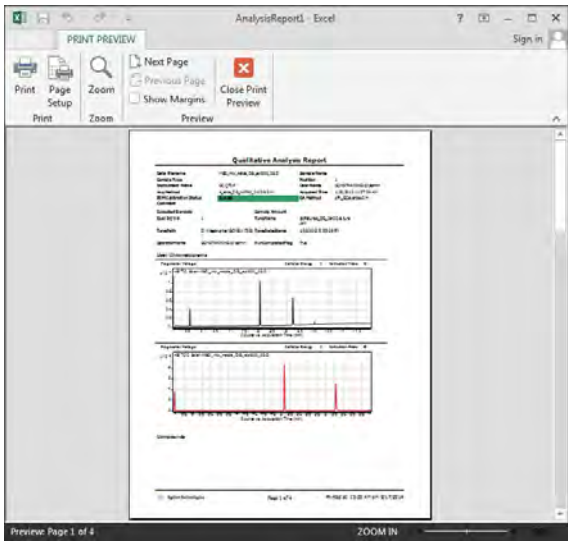


Рис. 61 Окно просмотра документа (Print Preview) с отчетом о результатах анализа

Задание 23. Печать отчета по соединениям

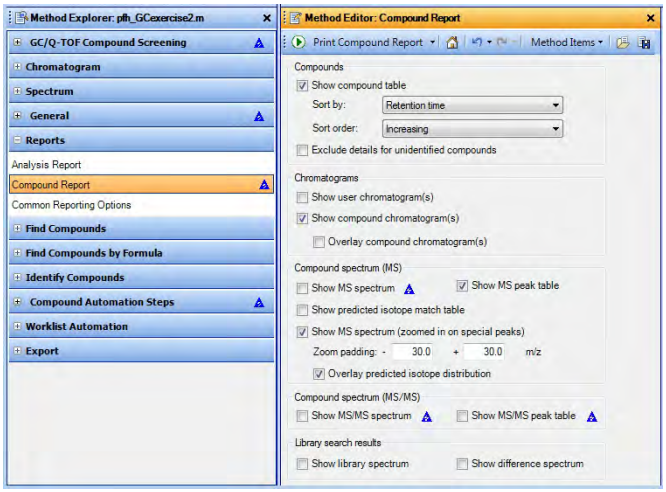
Следуйте этим инструкциям, когда вам понадобится распечатать отчет по соединениям.

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
1 Если файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** не загружен, откройте этот файл данных и выполните действия при открытии файла (File Open) для метода iii_GCexercise2.m, который был создан в «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111.	**a** Если программа еще не открыта, дважды щелкните **значок качественного анализа MassHunter (Qualitative Analysis)**. В другом случае щелкните **File (Файл) > Open Data File (Открыть файл данных)**. **b** Выберите файл данных **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** в папке образцов файлов данных **ГХ**. **c** Снимите отметку с пункта **Load result data (Загрузить результаты)**. **d** Отметьте пункт **Run 'File Open' actions from selected method (Выполнить действия при открытии файла из выбранного метода)**. **e** Нажмите кнопку **Use current method (Использовать текущий метод)** и щелкните **Open (Открыть)**.	• После выполнения «Задание 20. Настройка и выполнение метода с использованием процесса скрининга соединений ГХ/Q-TOF» на стр. 111 текущим методом будет iii_GCexercise2.m. Этот метод настроен на выполнение алгоритма поиска соединений по деконволюции хроматограммы (Find Compounds by Chromatogram Deconvolution) и затем на выполнение алгоритма поиска по библиотекам для каждого соединения.
2 Измените некоторые выбранные элементы в методе для отчетов по соединениям: • Выключите просмотр спектров МС, приближенных на определенных пиках. • Выключите параметры МС/МС в отчете.	**a** В обозревателе методов щелкните **Reports (Отчеты) > Compound Report (Отчет по соединениям)**. **b** (дополнительно) Снимите флажок с пункта **Show MS spectrum (Показать спектр МС)**. **c** (дополнительно) Снимите флажок с пункта **Show MS/MS spectrum (Показать спектр МС-МС)**. **d** (дополнительно) Снимите выделение с пункта **Show MS/MS peak table (Показать таблицу пиков МС-МС)**.	• Эти пункты позволяют вам указывать информацию, которую необходимо включить в отчет, если она доступна. Если информация недоступна, этот раздел будет автоматически пропущен. Например, результаты МС/МС не будут включены, если файл данных содержит только данные МС.

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии



Для данных ГХ/Q-TOF необходимо снять флажок с пункта Overlay compound chromatograms (Наложение хроматограмм соединений).

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

3 (дополнительно) Выберите другой шаблон отчета по соединениям.

a В окне редактора методов (Method Explorer) щелкните **Reports (Отчеты) > Common Reporting Options (Общие параметры отчетов).**

b Выберите **CompoundReport WithIdentificationHits.xlsx** в качестве шаблона отчета по соединениям.

- Это программное обеспечение содержит несколько шаблонов отчетов.
- Вы можете изменить шаблон отчета с помощью приложения Excel и встроенного дополнения Report Designer.

Задание 23. Печать отчета по соединениям

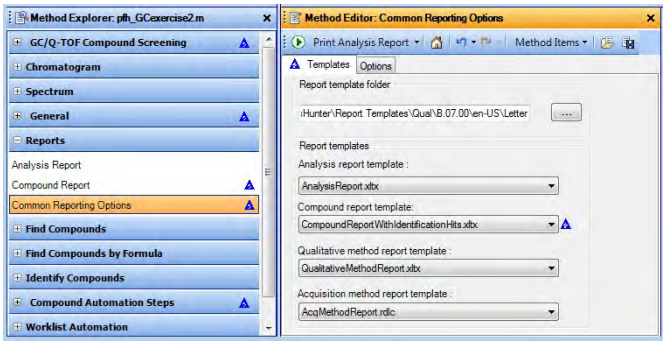
Шаг	Подробные инструкции	Комментарии
		**Вы можете использовать приложение Excel и встроенное дополнение Report Designer, чтобы изменить любой шаблон отчета с расширением XLTX. Вы не можете изменить отчет метода сбора данных.**

Рис. 63 Раздел общих параметров отчетов (Common Reporting Options) в редакторе методов (Method Editor)

4 Распечатайте отчет.

a Щелкните **File (Файл) > Print (Печать) > Compound Report (Отчет по соединениям)** или щелкните стрелку на значке **Print Analysis Report (Печатать отчет результатах анализа)** и нажмите **Print Compound Report (Печатать отчет по соединениям)**, чтобы распечатать отчет по соединениям.

b Отметьте пункт **Print preview (Просмотр документа)**.

c Нажмите кнопку **OK**. Просмотрите отчет.

d Щелкните значок **Close Print Preview (Закрыть просмотр документа)**.

- В диалоговом окне Print Compound Report (Печатать отчет по соединениям) вы можете выбрать другой принтер, сохранить отчет в файл PDF или Excel, выбрать для печати все результаты или только выделенные результаты и объединить разные файлы данных в один отчет.
- Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help) или обучающий DVD-диск по созданию отчетов.

Задание 23. Печать отчета по соединениям

Шаг	Подробные инструкции	Комментарии

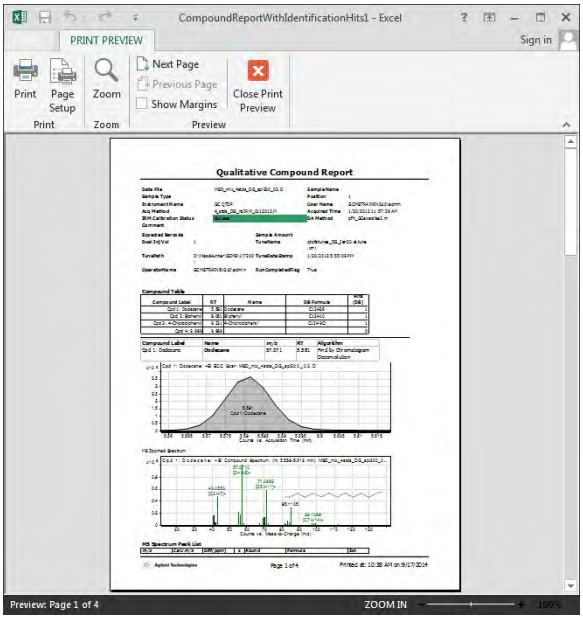


Рис. 64 Окно Print Preview (Просмотр документа) с отчетом по соединениям

5 Закройте файл данных без сохранения результатов.

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

b Ответьте **No (Нет)** на вопрос о сохранении результатов.

Справка

Navigator View (Представление навигатора) и Compound Details View (Представление сведений о соединениях) 128
Работа с окнами 129
Работа с результатами в Data Navigator (Навигатор по данным) 132
Выполнение операций на хроматограмме 133
Выполнение операций на спектрах МС или МС-МС 135
Работа с визуальными хроматографическими данными 136
Работа с визуальными спектральными данными 139
Рабочие процессы 141
Настройка шаблона отчета 146

Navigator View (Представление навигатора) и Compound Details View (Представление сведений о соединениях)

ПО для качественного анализа имеет два различных представления. В каждом из этих представлений доступны различные окна. Представление, используемое в главной панели инструментов, можно выбирать. В обоих представлениях доступны следующие окна:

- Method Explorer (Обозреватель методов)
- Method Editor (Редактор методов)
- Difference Results (Разница результатов)
- Compound List (Список соединений)
- Compound Identification Results (Результаты определения соединений)
- MS/MS Formula Details (Сведения о формулах МС/МС)
- Structure Viewer (Средство просмотра структуры)

Navigator View (Представление навигатора)

Представление навигатора является представлением по умолчанию. В этом представлении окно навигатора по данным (Data Navigator) можно использовать для выбора различных соединений, спектров и хроматограмм.

Это представление следует использовать при работе с несколькими файлами данных или со спектрами. При работе с соединениями можно использовать либо это представление, либо представление сведений о соединениях (Compound Details View).

Compound Details View (Представление сведений о соединениях)

Это представление ориентировано на соединения из одного файла данных. Информация по одному конкретному соединению представлена в нескольких окнах. Изменить выбранное соединение можно в окне Compound List (Список соединений).

Это представление понадобится при просмотре соединений, найденных с помощью алгоритма Find by Formula (Найти по формуле), особенно если они были найдены с подтверждением фрагмента. Это представление может использоваться и при просмотре других видов соединений.

Работа с окнами

При первом открытии программы Программа качественного анализа вы увидите четыре окна, расположенных по умолчанию: Data Navigator (Навигатор по данным), Method Explorer (Обозреватель методов), Chromatogram Results (Результаты хроматограммы) и MS Spectrum Results (Результаты спектра МС). Можно переключаться между представлениями Navigator View (Представление навигатора) и Compound Details View (Представление сведений о соединениях).

В представлении Navigator View (Представление навигатора) можно создать семнадцать других окон с помощью меню View (Просмотр):

- Method Editor (Редактор методов) — позволяет редактировать параметры методов, находящиеся на разных вкладках
- Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров) — позволяет быстро сканировать спектры в файле данных
- MS Spectrum Results (Результаты спектров МС) — отображает спектры МС и МС/МС
- Difference Results (Результаты по разнице) — отображает разницу по результатам поиска в библиотеке
- Deconvolution Results (Результаты деконволюции) — отображает спектры, прошедшие деконволюцию
- Deconvolution Mirror Plot (Зеркальный график деконволюции) — зеркально отображает два спектра, прошедших деконволюцию
- UV Spectrum Results (Результаты спектра УФ) — отображает спектр УФ; доступно только для данных ЖХ/МС
- Integration Peak List (Список пиков интегрирования) — отображает таблицу результатов интегрирования
- MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 пиков спектра МС) — отображает таблицу пиков для первого выбранного спектра
- MS Spectrum Peak List 2 (Список 2 пиков спектра МС) — отображает таблицу пиков для второго выбранного спектра
- MS Actuals (Фактические данные МС) — отображает информацию о сборе данных для выделенного спектра
- Compound List (Список соединений) — отображает соединения, найденные с помощью одного из алгоритмов Find Compounds (Поиск соединений)

- Compound Identification Results (Результаты идентификации соединений) — отображает информацию о идентификации для выбранного соединения
- Spectrum Identification Results (Результаты идентификации спектров) — отображает информацию о идентификации для выбранных спектров
- MS/MS Formula Details (Сведения о формулах МС/МС) — отображает таблицу возможных формул, вычисленных для фрагментов в спектре МС/МС
- Structure Viewer (Средство просмотра структуры) — отображает структуру, связанную с текущим соединением или спектром
- Sample Information (Информация о пробах) — отображает информацию о выделенном файле данных
- Sequence Editor (Редактор последовательности) — позволяет редактировать последовательность методов

Кроме того, можно отобразить три окна инструментов, которые открываются при использовании соответствующего инструмента:

- Formula Calculator (Калькулятор формул)
- Mass Calculator (Калькулятор масс)
- Recalibrate (Перекалибровка)

Значки окон на главной панели инструментов

С помощью этих значков на главной панели инструментов открываются и закрываются соответствующие окна. Дополнительные значки доступны после установки программного обеспечения MassHunter BioConfirm. Для открытия окон также можно использовать команды в меню View (Просмотр).

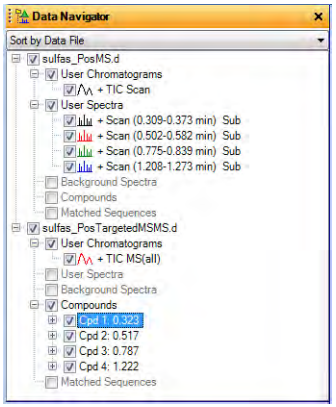
Значок панели инструментов	Окно
	Окно Data Navigator (Навигатор по данным) Окно Method Explorer (Обозреватель методов) Окно Method Editor (Редактор методов)

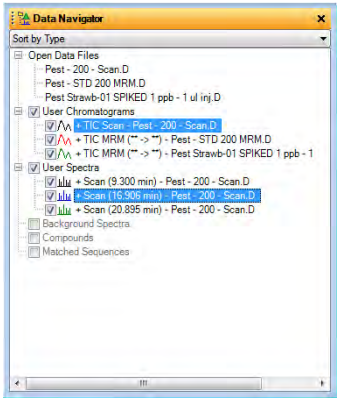
Значок панели инструментов	Окно
	Окно Chromatogram Results (Результаты для хроматограмм) Окно Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров) Окно MS Spectrum Results (Результаты спектра МС) Окно Difference Results (Результаты по разнице) Окно Deconvolution Results (Результаты деконволюции) Окно Deconvolution Mirror Plot (Зеркальный график деконволюции) Окно UV Spectrum Results (Результаты УФ спектра)
	Окно Integration Peak List (Список пиков интегрирования) Окно MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 пиков спектра МС) Окно MS Spectrum Peak List 2 (Список 2 пиков спектра МС) Окно MS Actuals (Фактические данные МС)
	Окно Compound List (Список соединений) Окно Compound Identification Results (Результаты определения соединений) Окно Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров) Окно MS/MS Formula Details (Сведения о формулах МС-МС) Окно Structure Viewer (Средство просмотра структуры) Окно Sample Information (Сведения о пробе) Окно Sequence Editor (Редактор последовательности)

Работа с результатами в Data Navigator (Навигатор по данным)

Окно и инструменты Data Navigator (Навигатор по данным)

Data Navigator (Навигатор по данным) упорядочивает все результаты извлечения и выбора спектров по файлам данных или типам данных. Это окно доступно только в Navigator View (Представление навигатора).







Значок Linked Navigation (Связанная навигация)

Если эта функция активирована (значение по умолчанию), при выделении хроматограммы в Data Navigator (Навигатор по данным) также выделяются соответствующие спектры. А также выделяются соответствующие хроматограмма и графические результаты спектра. Linked Navigation (Связанная навигация) работает только при использовании пунктов меню Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрирование и извлечение спектров пиков) в меню Chromatograms (Хроматограммы) или при запуске алгоритмов для соединений.



Инструменты отметок

Одинарная отметка — ставит отметки для всех выделенных данных.

Двойные отметки, одна серая — ставит отметки для выделенных данных и снимает отметки для других данных.

Двойные отметки — ставит отметки везде.

Хроматограммы и спектры отображаются, если отмечены.

Выполнение операций на хроматограмме

Следующие операции можно выполнить на всей хроматограмме или на ее выбранном участке при помощи пунктов меню:

Действие	Пункт меню
Изменение маркировки пиков на хроматограмме	Configuration (Настройка) > Chromatogram Display Options (Параметры отображения хроматограммы)
Извлечение хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Chromatograms (Извлечь хроматограммы)
Извлечение определенных хроматограмм	Chromatograms (Хроматограммы) > Extract Defined Chromatograms (Извлечь определенные хроматограммы)
Интегрирование хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate Chromatogram (Интегрировать хроматограмму)
Интегрирование и извлечение спектров пиков	Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Extract Peak Spectra (Интегрировать и извлечь спектры пиков)
Интегрирование и деконволюция спектров пиков	Chromatograms (Хроматограммы) > Integrate and Deconvolute Peak Spectra (Интегрировать и выполнить деконволюцию спектров пиков)
Сглаживание хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Smooth Chromatogram (Сгладить хроматограмму)
Вычитание хроматограммы	Chromatograms (Хроматограммы) > Subtract Any Chromatogram (Вычесть хроматограмму)
Вычисление соотношения «сигнал-шум»	Chromatograms (Хроматограммы) > Calculate Signal-to-Noise (Вычислить соотношение «сигнал-шум»)
Поиск соединений по автоматической МС/МС	Find (Поиск) > Find Compounds by Auto MS/MS (Найти соединения по автоматической МС-МС)
Поиск соединений в данных целевой МС/МС	Find (Поиск) > Find Compounds by Targeted MS/MS (Найти соединения по целевой МС-МС)
Поиск соединений для данных МС(1)	Find (Поиск) > Find Compounds by Molecular Feature (Найти соединения по молекулярным особенностям)

Действие	Пункт меню
Поиск соединений для данных ГХ/МС	Find (Поиск) > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution (Найти соединения по деконволюции хроматограммы)
Поиск соединений для данных MRM	Find (Поиск) > Find Compounds by MRM (Найти соединения по MRM)
Поиск соединений по результатам интегрирования	Find (Поиск) > Find Compounds by Integration (Найти соединения по интегрированию)
Поиск соединений, которые соответствуют определенным формулам	Find (Поиск) > Find Compounds by Formula (Найти соединения по формуле)

Выбор операций с диапазоном в контекстном меню

После выбора хроматографического диапазона можно извлечь спектр, извлечь спектр фона, а также выполнить операции, упомянутые выше, и другие операции.

1. Для доступа к этим операциям выберите инструмент Range Select (Выбор диапазона, ) на панели инструментов окна Chromatogram Results (Результаты хроматограммы).
2. Щелкните в том месте, где хотите начать диапазон, проведите курсором по всей длине диапазона, а затем отпустите кнопку мыши.
3. Щелкните правой кнопкой мышки в любом месте хроматограммы, а затем выберите операцию в контекстном меню.

Сохранение результатов в файлы данных

- Щелкните значок **Save**  **(Сохранить)** или **File (Файл) > Save Results (Сохранить результаты)**.

  При выходе из программы вы получите предложение сохранить результаты в файл данных, если эта функция не выключена (выключается в диалоговом окне параметров сообщений (Message Box Options)

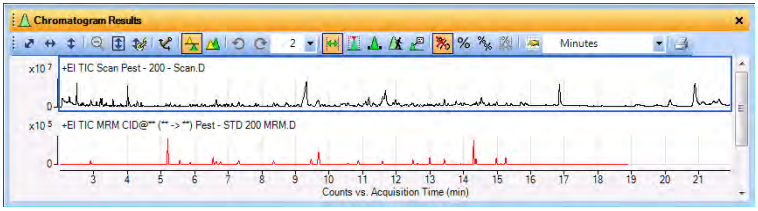
Выполнение операций на спектрах MC или MC-MC

Следующие операции можно выполнить на всем спектре MC или MC/MC, а также на его выбранном участке при помощи пунктов меню:

Действие	Пункт меню
Просмотр значений m/z, интенсивности, зарядового состояния и другой информации о пиках спектра	View (Просмотр) > MS Spectrum Peak List 1 (Список 1 пиков спектра MC)
Изменение маркировки спектральных пиков	Configuration (Настройка) > MS and MS/MS Spectra Display Options (Параметры отображения спектров MC и MC-MC)
Вычитание фонового спектра	Spectra (Спектры) > Subtract Background Spectrum (Вычесть фоновый спектр)
Вычитание любого спектра	Spectra (Спектры) > Subtract Any Spectrum (Вычесть любой спектр), а затем выбрать другой спектр
Сложение двух спектров	Spectra (Спектры) > Add Any Spectrum (Прибавить любой спектр), а затем выбрать другой спектр
Поиск в базе данных записей, которые соответствуют определенным значениям массы в спектре	Spectra (Спектры) > Search Database for Spectrum Peaks (Поиск пиков спектров в базе данных)
Создание формул для значений массы в выбранном диапазоне спектра	Spectra (Спектры) > Generate Formulas from Spectrum Peaks (Создать формулы из пиков спектра), если в спектре MC выбран диапазон
Поиск в библиотеке	Identify (Определить) > Search Library for Spectra (Поиск спектра в библиотеке) или Spectra (Спектры) > Search Library for Spectra (Поиск спектров в библиотеке)

Работа с визуальными хроматографическими данными

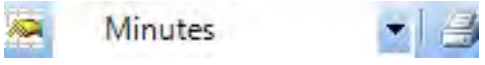
Окно Chromatogram Results (Результаты для хроматограмм)



Инструменты для работы с результатами хроматограммы

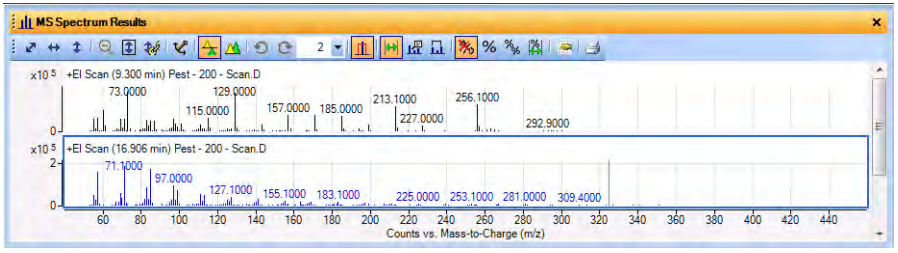
Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования 	• Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба • Режим связанной оси Y

Значок панели инструментов	Действие
	• **Anchor chromatogram (Закрепление хроматограммы)** — текущая хроматограмма является видимой до выбора команды **Clear Anchor (Отменить закрепление)**. • **List mode (Режим списка)** — хроматограммы построены таким образом, что каждая из них имеет отдельную ось Y. • **Overlay mode (Режим наложения)** — хроматограммы построены на одних и тех же осях X и Y • **Switches to previous plot (Переход к предыдущему графику)**. Эта кнопка доступна только в режиме наложения. • **Switches to next plot (Переход к следующему графику)**. Эта кнопка доступна только в режиме наложения. • **Number of spectra to show (Количество показываемых спектров)** одновременно перед добавлением полосы прокрутки.

Значок панели инструментов	Действие
Выбор инструментов по порядку  Всегда должен быть выбран один из этих инструментов. На этом рисунке показан выбор инструмента Range Select (Выбор диапазона). Выбранный инструмент имеет оранжевый цвет фона.	• **Выбор диапазона (Range Select)** — если функция включена, можно обозначить диапазон хроматограммы, к которому нужно применить действия. • **Peak Select (Выбор пиков)** — если функция включена, можно выбрать спектр на вершине интегрированного пика. • **Manual Integration (Ручное интегрирование)** — если функция включена, можно выполнять интегрирование в интерактивном режиме. • **Walk Chromatogram (Осмотр хроматограммы)** — если функция включена, можно увидеть отдельные спектры по мере передвижения между точками с помощью мыши или клавиш со стрелками (влево и вправо) на клавиатуре. • **Annotation (Аннотирование)** — если функция включена, можно добавлять изображения и текстовые комментарии к хроматограммам.
Инструменты нормализации 	• Прекращение нормализации хроматограмм • Нормализация всех хроматограмм по наибольшему пику на любой из них • Нормализация каждой из хроматограмм по наибольшему пику на ней • Нормализация каждой из хроматограмм по наибольшему пику в пределах выбранного диапазона
Другие инструменты 	• Открытие диалогового окна **Chromatogram Display Options (Параметры отображения хроматограммы)** • Настройка единиц измерения, используемых для отображения хроматограммы • Печать отображенных хроматограмм

Работа с визуальными спектральными данными

Окно MS Spectrum Results (Результаты спектра МС)



Инструменты для работы с результатами спектра МС

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты масштабирования 	• Автоматическое масштабирование осей X и Y • Автоматическое масштабирование оси X • Автоматическое масштабирование оси Y • Уменьшение масштаба • Автоматическое масштабирование оси Y во время увеличения масштаба • Режим связанной оси Y

Значок панели инструментов	Действие
	• **Anchor spectrum (Закрепление спектра)** — текущий спектр является видимым до выбора команды Clear Anchor (Отменить закрепление). • **List mode (Режим списка)** — спектры построены таким образом, что каждый из них имеет отдельную ось Y. • **Overlay mode (Режим наложения)** — спектры построены на одних и тех же осях X и Y • **Switches to previous plot (Переход к предыдущему графику)**. Эта кнопка доступна только в режиме наложения. • **Switches to next plot (Переход к следующему графику)**. Эта кнопка доступна только в режиме наложения. • **Number of spectra to show (Количество показываемых спектров)** одновременно перед добавлением полосы прокрутки.
Выбор инструментов по порядку  Всегда должен быть выбран один из этих инструментов. На этом рисунке показан выбор инструмента Range Select (Выбор диапазона). Выбранный инструмент имеет оранжевый цвет фона.	• **Range Select (Выбор диапазона)** — если функция **включена**, можно обозначить диапазон спектра, к которому нужно применить действия. • **Annotation (Аннотирование)** — если функция **включена**, можно добавлять изображения и текстовые комментарии к спектрам. • **Calipers (Измерители)** — если функция **включена**, можно добавить измеритель разности масс к выбранному спектру. В окне Deconvolution Results (Результаты деконволюции) можно также добавить измеритель аминокислот или измеритель модификаций. Для получения дополнительной информации см. онлайн-справку (Help).

Значок панели инструментов	Действие
Инструменты нормализации 	• Прекращение нормализации спектров • Нормализация всех спектров по наибольшему пику на любом из них • Нормализация каждого из спектров по наибольшему пику на нем • Нормализация каждого из спектров по наибольшему пику в пределах выбранного диапазона
Другие инструменты 	• Открытие диалогового окна **MS and MS/MS Spectra Display Options (Параметры отображения спектров МС и МС-МС)** • Печать отображенных спектров

Рабочие процессы

Рабочие процессы помогут настроить интерфейс пользователя приложения. Каждый рабочий процесс загружает тот метод, параметры которого соответствуют этому рабочему процессу. Кроме того, рабочий процесс загружает свою компоновку, которая подразумевает изменение столбцов, отображаемых в каждой таблице. И наконец, в четырех конфигурациях добавлен специальный раздел редактирования методов, в котором содержатся копии разделов метода, имеющие значение для этого рабочего процесса. Группировка функций, используемых при определенном рабочем процессе, облегчит настройку метода.

В программе Qualitative Analysis (качественный анализ) доступны несколько различных рабочих процессов. Это:

- General (Общие)
- **BioConfirm** – эти рабочие процессы доступны только после установки программного обеспечения BioConfirm и отметки флажком соответствующего пункта в диалоговом окне **User Interface Configuration (Настройка интерфейса пользователя)**. В BioConfirm можно выбирать между несколькими возможными рабочими процессами, в зависимости от типа анализа, который нужно провести. BioConfirm используется с файлами данных ЖХ/МС.

- **Просмотр пиков хроматограммы**
- **Подтверждение формул и чистота проб**
- **Скрининг целевых соединений МС**
- **Скрининг соединений ГХ/Q-TOF**

При работе с данными ГХ/МС можно использовать рабочий процесс **General (Общие)** или рабочий процесс **GC/Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХ/Q-TOF)**. При работе с данными ВЭЖХ/МС можно выбрать любой рабочий процесс, кроме рабочего процесса **GC Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХ/Q-TOF)**.

Особый метод

Каждый рабочий процесс загружает особый метод, который используется по умолчанию, с настройками, соответствующими этому рабочему процессу. Например, если выбрать один из рабочих процессов BioConfirm, параметр **Target data type** (Требуемый тип данных) для алгоритма Find Compounds by Molecular Feature (Поиск соединений по молекулярным особенностям) устанавливается на значение **Large molecules (proteins, oligos)** (Большие молекулы (белки, олигомеры)). Такая настройка подходит для рабочих процессов BioConfirm, но не подходит для использования с другими рабочими процессами по умолчанию.

Особая компоновка

Каждый рабочий процесс загружает свою особую компоновку. Компоновка определяет:

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

Для каждого окна графиков (окна Chromatogram Results (Результаты хроматограммы), Spectrum Preview (Предварительный просмотр спектров), MS Spectrum Results (Результаты спектра МС), Deconvolution (Деконволюция), UV Results (Результаты УФ), Compound Chromatogram Results (Результаты хроматограммы соединения), Overall Chromatogram Results (Общие результаты хроматограммы), Compound MS Spectrum Results (Результаты спектра МС соединений) и Compound Fragment Spectrum Results (Результаты спектра фрагмента соединений)) сохраняется следующее:

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

Для каждого окна таблиц сохраняется следующее:

- Какие столбцы отображаются
- Порядок столбцов
- Ширина каждого столбца
- Фильтры, добавленные в таблицу (доступно только для таблицы Compound List (Список соединений), таблицы Compound Identification Results (Результаты определения соединений) и окна Spectrum Identification Results (Результаты определения спектров)).

Особые разделы в обозревателе методов (Method Explorer) и редакторе методов (Method Editor)

Используя Method Editor (Редактор методов) с общим рабочим процессом (General), можно изменять практически все параметры метода.

Каждый другой рабочий процесс добавляет раздел к Method Explorer (Обозреватель методов). Каждый новый раздел содержит только вкладки и разделы Method Editor (Редактор методов), которые могут быть полезны в этом рабочем процессе. Изменение параметра в разделе рабочего процесса также изменяет этот параметр в соответствующем месте общих разделов Method Editor (Редактор методов).

Две вкладки не могут повторяться в общих разделах Method Editor (Редактор методов). Раздел **Chromatogram Peak Survey Workflow (Рабочий процесс просмотра пиков хроматограммы) > Spectrum Peak Identification (Идентификация пиков спектров)** и вкладка **Chromatogram Peak Survey Workflow (Рабочий процесс просмотра пиков хроматограммы) > Chromatogram Extraction (Извлечение хроматограммы) > Chromatograms (Хроматограммы)** есть только в рабочем процессе просмотра пиков хроматограммы. Эти разделы имеют влияние только на алгоритм просмотра пиков хроматограммы. Этот алгоритм используется только в данном рабочем процессе, а также при выполнении действий **Chromatogram Peak Survey without Report (Просмотр пиков хроматограммы без отчета)** и **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report (Просмотр пиков хроматограммы с отчетом о результатах анализа)**.

Методы и компоновки для рабочих процессов

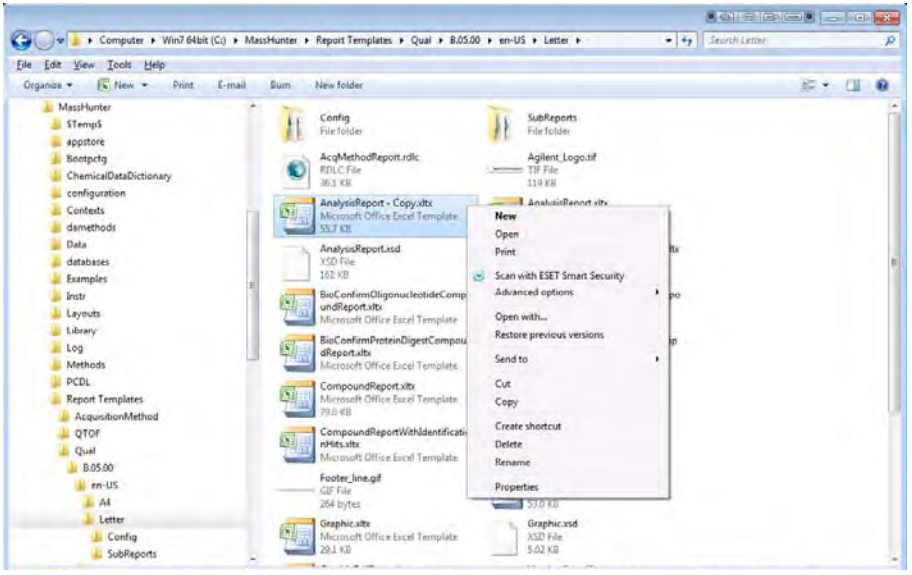
Для каждого рабочего процесса предоставляются дополнительные методы и компоновки, использующиеся по умолчанию.

Рабочий процесс	Метод	Компоновка	Раздел в Method Editor (Редактор методов)
General (Общие)	default.m	Default.xml	Нет
Chromatogram Peak Survey (Просмотр пиков хроматограммы)	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	Рабочий процесс просмотра пиков хроматограммы
Formula Confirmation and Sample Purity (Подтверждение формул и чистота проб)	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Рабочий процесс подтверждения формул и чистоты проб
MS Target Compound Screening (Скрининг целевых соединений МС)	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	Рабочий процесс скрининга целевых соединений МС
GC Q-TOF Compound Screening (Скрининг соединений ГХ Q-TOF)	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	Скрининг соединений ГХ/Q-TOF

Настройка шаблона отчета

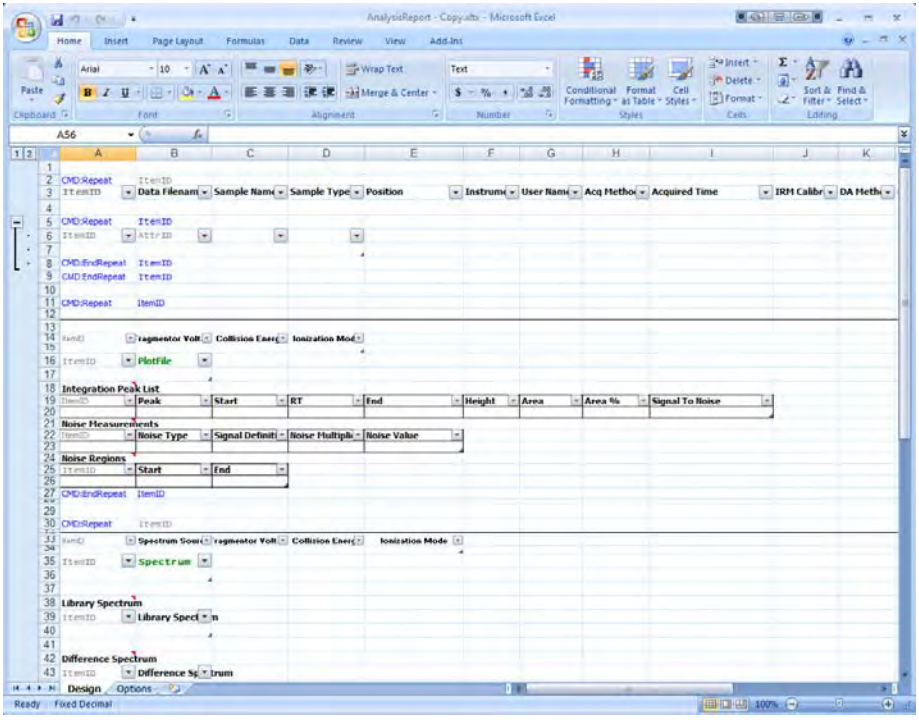
Для получения подробной информации об изменении шаблона отчета см. онлайн-справку (Help) встроенного дополнения MassHunter Report Designer Add-in, руководство по ознакомлению с Report Designer или обучающие материалы на DVD-диске Reporting Training. При выполнении следующих действий вы ознакомитесь с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

1. Перейдите в папку с шаблонами отчетов. По умолчанию это папка **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.07.00\en-US\Letter**. Можно выбрать другую папку в Method Explorer (Обозреватель методов) на вкладке General (Общие) > Common Reporting Options (Общие параметры представления отчетов) > Templates (Шаблоны).
2. Создайте копию шаблона, который нужно изменить.
3. Щелкните правой кнопкой мыши копию и выберите пункт **Properties** (Свойства). Если необходимо, снимите отметку пункта **Read-only** (Только чтение). Затем щелкните правой кнопкой мыши копию и выберите пункт **Open** (Открыть) в контекстном меню.



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

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



4 Сделайте необходимые изменения.

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

5 Чтобы сохранить новый шаблон, нажмите кнопку Microsoft Office **Save (Сохранить)** или **Save As (Сохранить как) > Other Formats (Другие форматы)**.

6 Введите название файла и щелкните **Save** (Сохранить).



www.agilent.com

В этой книге

Руководство содержит информацию для обучения по использованию ПО Agilent MassHunter Workstation — программы качественного анализа с данными ГХ/МС.

© Agilent Technologies, Inc. 2014

Редакция A, сентябрь 2014 г.

G3336-98024

Agilent Technologies