

---

# Logiciel SCIEX OS

**Pour systèmes X500 QTOF et ZenoTOF 7600**

Guide de l'utilisateur du logiciel



---

Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement SCIEX afin de les informer sur le fonctionnement de leur équipement SCIEX. Ce document est protégé par les droits d'auteur et toute reproduction de tout ou partie de son contenu est strictement interdite, sauf autorisation écrite de SCIEX.

Le logiciel éventuellement décrit dans le présent document est fourni en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de décomposer un logiciel intégré, d'inverser sa conception ou de le décompiler à quelque fin que ce soit. Les garanties sont celles indiquées dans le présent document.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants ou à leurs produits, qui peuvent comprendre des pièces dont les noms sont des marques déposées ou fonctionnent comme des marques de commerce appartenant à leurs propriétaires respectifs. Cet usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par SCIEX intégrés dans ses équipements et n'induit pas implicitement le droit et/ou l'autorisation de tiers d'utiliser ces noms de produits comme des marques commerciales.

Les garanties fournies par SCIEX se limitent aux garanties expressément offertes au moment de la vente ou de la cession de la licence de ses produits. Elles sont les uniques représentations, garanties et obligations exclusives de SCIEX. SCIEX ne fournit aucune autre garantie, quelle qu'elle soit, expresse ou implicite, notamment quant à leur qualité marchande ou à leur adéquation à un usage particulier, en vertu d'un texte législatif ou de la loi, ou découlant d'une conduite habituelle ou de l'usage du commerce, toutes étant expressément exclues, et ne prend en charge aucune responsabilité ou passif éventuel, y compris des dommages directs ou indirects, concernant une quelconque utilisation effectuée par l'acheteur ou toute conséquence néfaste en découlant.

Réservé exclusivement à des fins de recherche. Ne pas utiliser dans le cadre de procédures de diagnostic.

Les marques commerciales et/ou marques déposées mentionnées dans le présent document, y compris les logos associés, appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd, ou à leurs propriétaires respectifs, aux États-Unis et/ou dans certains autres pays (voir [sciex.com/trademarks](http://sciex.com/trademarks)).

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Table des matières

---

<b>Chapitre 1 : Introduction</b> .....	<b>9</b>
Présentation du logiciel.....	9
Ouvrez le logiciel.....	9
À propos de la page d'accueil.....	9
À propos du ruban et du lanceur.....	12
À propos du panneau d'état.....	14
Volet Data Acquisition.....	18
Verrouiller l'écran.....	19
Déverrouillez le logiciel.....	19
Assistance de cahier de laboratoire électronique.....	20
Symboles et conventions de la documentation.....	20
<b>Chapitre 2 : Instructions d'utilisation — Configuration de l'appareil</b> .....	<b>21</b>
Ajouter des appareils.....	21
Supprimer des appareils.....	21
Modifier les paramètres de l'appareil.....	22
<b>Chapitre 3 : Instructions d'utilisation — Configuration logicielle</b> .....	<b>23</b>
À propos des projets et des répertoires racines.....	23
Ajouter un répertoire racine.....	23
Supprimer un répertoire racine.....	24
Spécifier un compte réseau sécurisé.....	24
Ajouter un projet.....	24
Ajouter un sous-dossier.....	25
Sélectionner les options de file d'attente.....	25
Sélectionner les paramètres du LIMS (Laboratory Information Management System).....	26
Activer le mode Plein écran.....	26
Sélectionner les paramètres régionaux.....	26
Gérer les bibliothèques de composés.....	27
Importer un progiciel LibraryView.....	27
Importer une base de données de composés.....	27
Importer un progiciel Cliquid.....	28
Importer un fichier Excel.....	29
Importer un instantané de la base de données de la bibliothèque.....	30
Importer un progiciel de bibliothèque d'un tiers.....	31
Installer un progiciel LibraryView sous licence.....	31
Conflits entre des composés.....	33
Ajouter un composé.....	35
Ajouter un spectre de masse à un composé.....	35
<b>Chapitre 4 : Instructions d'utilisation—Processus utilisateur</b> .....	<b>37</b>

## Table des matières

---

Analystes .....	37
Développeurs de méthodes .....	37
Administrateurs .....	38
Réviseurs .....	38
<b>Chapitre 5 : Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition .....</b>	<b>39</b>
Espace de travail MS Method .....	39
Créer une méthode MS .....	39
Créer une méthode MRM HR avec Guided MRM HR .....	42
Expériences de méthodes MS .....	43
À propos des méthodes MS .....	44
Calculer l'énergie de collision dynamique pour les méthodes MS .....	46
Ouvrir une méthode MS .....	46
Exécuter une méthode MS manuellement .....	47
Espace de travail LC Method .....	49
Créer une méthode LC .....	49
Espace de travail Batch .....	50
Gérer le lot .....	54
Importer un lot depuis un fichier .....	58
Importer un lot depuis un LIMS .....	59
Créer un lot manuellement .....	60
Utiliser la fonction Plate Layout pour créer un lot .....	62
Créer un tableau de référence d'ions .....	63
Étalonner le système à l'aide du CDS .....	64
Étalonner le système selon une méthode LC .....	65
Gérer les concentrations des composants .....	65
Gérer les règles de décision .....	66
Équilibrer le système .....	68
Envoyer un lot .....	68
Soumettre un échantillon unique à la file d'attente depuis l'espace de travail Batch ...	69
Soumettre plusieurs échantillons à la file d'attente depuis l'espace de travail Batch ...	69
Espace de travail Queue .....	70
Gérer la file d'attente .....	72
Afficher ou masquer des colonnes .....	75
Icônes de la file d'attente .....	76
Espace de travail MS Tune .....	78
Effectuer un contrôle rapide de l'état .....	78
Optimiser le détecteur .....	79
Régler l'option Q1 Unit .....	80
Régler TOF .....	81
Régler l'option Q1 High .....	82
Étalonner Zeno (Systèmes ZenoTOF) .....	82
Réaliser l'optimisation EAD (Systèmes ZenoTOF) .....	83
Réaliser une réduction du bruit de fond EI EAD (Systèmes ZenoTOF) .....	84
Réaliser le diagnostic EAD (Systèmes ZenoTOF) .....	84
Réaliser l'initialisation ADC (Systèmes ZenoTOF) .....	84
Restaurer les données de l'instrument .....	84



---

<b>Chapitre 6 : Instructions d'utilisation—Traitement</b> .....	<b>86</b>
Espace de travail Explorer.....	86
Ouvrir les échantillons.....	86
Vérifier la présence d'un analyte.....	86
Extraire des ions.....	87
Ouvrir un chromatogramme en courant ionique total.....	88
Ouvrir un chromatogramme de pics de base (BPC).....	90
Afficher un tableau des données et des pics.....	92
Afficher les informations sur l'échantillon.....	94
Afficher les informations de sélection de graphique.....	94
Modifier des paramètres dans des graphiques.....	96
Travailler avec des données dans des graphiques.....	97
Utiliser les outils de fonctionnement de deux volets.....	102
Déplacer des volets ou des fenêtres.....	104
Réaliser un lissage gaussien.....	105
Données de seuil.....	106
Sous-ensemble de données avec sélection de graphique.....	106
Soustraire la référence dans un chromatogramme.....	107
Décaler un chromatogramme.....	108
Spectre du centroïde.....	109
Exporter les données en tant que texte.....	110
Exporter la liste de pics en tant que texte.....	111
Imprimer les données.....	112
Réinitialiser les options.....	112
Régler les options.....	112
Espace de travail Analytics.....	113
Définir les paramètres de traitement par défaut pour le projet.....	114
Utilisation des dispositions des espaces de travail.....	115
Définir les paramètres d'exportation sécurisée du projet.....	117
Activer l'avertissement de modification de pic du projet.....	118
Création d'une méthode de traitement.....	118
Traiter des données.....	121
Utilisation des tableaux de résultats.....	128
Examen des pics.....	163
Analyser les données à l'aide des statistiques.....	176
Afficher la courbe d'étalonnage.....	179
Analyser les données à l'aide des tracés métriques.....	180
Modifier des modèles de rapport.....	181
Modèles Reporter.....	183
<b>Chapitre 7 : Événements</b> .....	<b>198</b>
Registres d'événements.....	198
Afficher les journaux.....	199
Archiver les journaux.....	199
Afficher les journaux archivés.....	200
Imprimer des journaux.....	200
Archives des registres d'événements.....	200

---

## Table des matières

---

<b>Chapitre 8 : Audit</b> .....	<b>202</b>
Afficher les enregistrements du registre d'audit.....	202
Filtrer les événements audités à l'aide de la recherche par mot-clé.....	202
Filtrer les événements audités à l'aide d'un ensemble de critères spécifiés.....	202
Imprimer le registre d'audit.....	204
<b>Annexe A : Principes de fonctionnement - Logiciel</b> .....	<b>205</b>
Manipulation des données.....	205
Techniques de balayage.....	205
Vue de données différente.....	205
Chromatogrammes.....	205
Spectres.....	207
Spectres de reconstruction.....	207
Règles de décision.....	208
Algorithme Dynamic Background Subtraction.....	208
Analyse quantitative.....	208
Ajout de standard.....	209
Mass Reconstruction.....	210
Analyse qualitative.....	211
Précision de masse.....	211
Temps de rétention.....	212
Modèle isotopique.....	212
Recherche dans la bibliothèque.....	213
Recherche de formules.....	213
Intégration.....	214
Paramètres de l'algorithme d'intégration AutoPeak.....	214
Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4.....	219
Régression.....	221
Équations de régression.....	222
Types de pondération.....	222
Coefficient de corrélation.....	223
Types de régression.....	223
Suppression automatique des données aberrantes.....	226
Tableaux de résultats.....	227
Calibration Curves.....	228
Ratio signal sur bruit.....	228
Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit.....	228
Ratio signal sur bruit avec pic à pic.....	232
Ratio signal sur bruit avec écart-type.....	232
Définir des régions de bruit.....	233
Colonnes calculées.....	233
Navigation dans l'interface des colonnes calculées.....	233
Extraction simple d'autres informations que les informations par défaut.....	235
Arithmétique simple.....	236
Fonctions plus complexes.....	236
Énoncés <b>IF</b> .....	237
Traiter les valeurs de texte résultantes comme.....	238

---

<b>Annexe B : Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact.....</b>	<b>240</b>
Étalonner le système en mode Batch.....	240
Étalonner le système à l'aide du CDS.....	240
Étalonner le système à l'aide du système LC.....	243
Étalonnage en mode Manual.....	246
Étalonner le système avec le CDS.....	246
Étalonner le système selon la méthode LC.....	246
<b>Annexe C : Masses exactes et formules chimiques.....</b>	<b>247</b>
<b>Annexe D : Tutoriel pour Explorer.....</b>	<b>249</b>
Introduction.....	249
Société.....	249
Options.....	250
Volets.....	250
Graphiques.....	255
Superpositions.....	262
Ouvrir des fichiers.....	263
Chromatogrammes et spectres.....	266
Graphiques de contour et cartes de chaleur.....	269
Utiliser des chromatogrammes et des spectres.....	272
Ouvrir un fichier de données.....	272
Afficher le TIC pour une expérience.....	274
Afficher un XIC pour une formule moléculaire connue.....	276
Générer et interagir avec un spectre.....	280
Utiliser un graphique de contour.....	286
Résumé.....	289
Utiliser IDA Explorer.....	290
Afficher et fusionner les spectres.....	290
Filtrer les données IDA.....	295
Utiliser un spectre de référence.....	297
Résumé.....	298
Utiliser des outils de structure.....	298
Associer une structure à un spectre MS/MS.....	299
Utiliser les fragments.....	302
Ajouter des sous-structures à un spectre.....	307
Utiliser les spectres MS/MS connexes.....	308
Résumé.....	311
Utiliser plusieurs échantillons.....	312
Utiliser deux échantillons.....	312
Utiliser plus de deux échantillons.....	319
Résumé.....	326
Utiliser la fonction Bio Tool Kit.....	327
Séquence manuelle.....	327
Ajouter et supprimer des points forts de la reconstitution manuelle.....	337
Option Digest Protein.....	340
Reconstitution peptidique LCMS.....	347

## Table des matières

---

Option Reconstruct Protein .....	354
Résumé .....	359
<b>Nous contacter .....</b>	<b>361</b>
Formation destinée aux clients .....	361
Centre d'apprentissage en ligne .....	361
Assistance technique SCIEX .....	361
Cybersécurité .....	361
Documentation .....	361

---

## Présentation du logiciel

Le logiciel SCIEX OS inclut dans un seul package les fonctions de contrôle d'instrument, d'acquisition des données, de traitement des données et d'établissement de rapports.

### Ouvrez le logiciel

1. Sélectionnez le logiciel depuis le menu Start :
  - Windows 7 : **Start > All Programs > SCIEX > SCIEX OS > SCIEX OS**
  - Windows 10 : **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

---

**Remarque** : Si le service **LibraryViewServiceHost** ne fonctionne pas, alors la boîte de dialogue User Account Control apparaît. Cliquez sur **Yes** pour lancer le service.

---

Si le logiciel est configuré pour le mode Integrated, la page Home apparaît.

Si le logiciel est configuré pour le mode Mixed, la boîte de dialogue Logon apparaît. Passez à l'étape suivante.

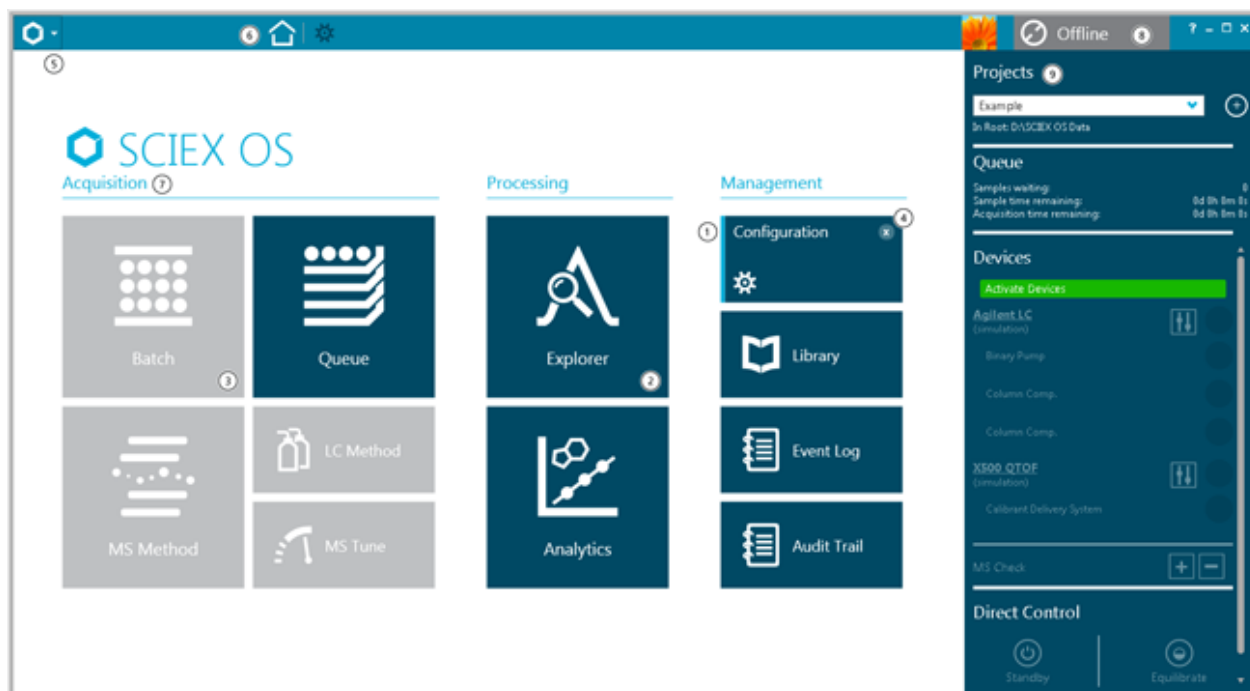
2. Si le logiciel Central Administrator Console (CAC) est utilisé et que SCIEX OS est configuré pour l'administration centralisée, sélectionnez le groupe de travail auquel vous allez vous connecter.
3. Si la boîte de dialogue Logon apparaît, saisissez le nom d'utilisateur et le mot de passe d'un utilisateur autorisé à utiliser le logiciel, puis cliquez sur **OK**.  
La page d'accueil s'ouvre.

### À propos de la page d'accueil

La page d'accueil comprend les volets de l'espace de travail, regroupés par fonction, le panneau d'état, le ruban et le lanceur. L'accès aux espaces de travail dépend du rôle attribué à l'utilisateur et de la licence.

## Introduction

Illustration 1-1 : Page d'accueil



Élément	Description
1	Une ligne verticale en bleu clair sur le côté gauche d'un volet bleu foncé indique que l'espace de travail est ouvert, que le travail est en cours et que l'utilisateur a accès à la fonctionnalité. L'état de l'espace de travail ouvert apparaît sur le volet.
2	Un volet bleu foncé indique que l'espace de travail est fermé.
3	Un volet gris indique que l'espace de travail n'est pas activé.
4	L'icône de fermeture (x) est indiquée dans le coin supérieur droit du volet lorsque l'espace de travail est ouvert.
5	Accès au lanceur. Le lanceur contient une liste de tous les espaces de travail. Cliquez sur ▼ à droite de l'icône pour ouvrir le lanceur.
6	Le ruban. Consulter la section : <a href="#">À propos du ruban et du lanceur</a> Pour naviguer vers un autre espace de travail, cliquez sur un espace de travail dans la liste. L'espace de travail actuellement ouvert reste actif et l'icône de l'espace de travail s'affiche dans le ruban. Pour fermer l'espace de travail actif, cliquez sur . Pour revenir à la page d'accueil, cliquez sur .
7	Fonctions : acquisition, traitement et gestion. L'accès dépend du rôle attribué à l'utilisateur et de la licence.
8	État du système. Cliquez sur la barre de titre pour afficher ou masquer le panneau d'état.

Élément	Description
9	Le panneau d'état. Consulter la section : <a href="#">À propos du panneau d'état</a>

Tableau 1-1 : Fonctions

Libellé	Description
<b>Acquisition</b>	(Acquisition) Utilisez les fonctions du groupe Acquisition pour créer des méthodes et des lots et pour soumettre des échantillons à l'acquisition. Les utilisateurs peuvent également ajuster le spectromètre de masse à l'aide de MS Tune.
<b>Processing</b>	(Traitement) Utilisez les fonctions du groupe Traitement pour le traitement quantitatif ou qualitatif des données.
<b>Management</b>	(Gestion) Utilisez les fonctions du groupe Gestion pour configurer les appareils, configurer l'accès au logiciel et consulter le journal des événements.

Tableau 1-2 : Volets

Libellé	Description
<b>Batch</b>	(Lot) Utilisez l'espace de travail Batch pour créer des lots et les soumettre à la file d'attente. Consulter la section : <a href="#">Espace de travail Batch</a>
<b>Queue</b>	(File d'attente) Utilisez l'espace de travail Queue pour surveiller l'état d'acquisition et de traitement, et pour gérer les échantillons dans la file d'attente. Consulter la section : <a href="#">Espace de travail Queue</a>
<b>MS Method</b>	(Méthode MS) Utilisez l'espace de travail MS Method pour créer et éditer des méthodes MS. Consulter la section : <a href="#">Espace de travail MS Method</a>
<b>LC Method</b>	(Méthode LC) Utilisez l'espace de travail LC Method pour créer et éditer des méthodes LC. Consulter la section : <a href="#">Espace de travail LC Method</a>
<b>MS Tune</b>	(Réglage MS) Utilisez l'espace de travail MS Tune pour optimiser le spectromètre de masse. Consulter la section : <a href="#">Espace de travail MS Tune</a>
<b>Explorer</b>	(Explorateur) Utilisez l'espace de travail Explorer pour examiner les données acquises. Voir la section: <a href="#">Espace de travail Explorer</a> .
<b>Analytics</b>	(Analytique) Utilisez l'espace de travail Analytics pour traiter et réviser les données acquises. Voir la section: <a href="#">Espace de travail Analytics</a> .

## Introduction

---

Tableau 1-2 : Volets (suite)

Libellé	Description
<b>Configuration</b>	(Configuration) Utilisez l'espace de travail Configuration pour configurer le logiciel, ajouter et activer des appareils, affecter des rôles aux utilisateurs et créer et affecter des cartes d'audit. Consultez le document : <i>Système d'aide</i> .
<b>Library</b>	(Bibliothèque) Utilisez l'espace de travail <b>Library</b> pour gérer les bibliothèques de composés.
<b>Event Log</b>	(Journal d'événements) Utilisez l'espace de travail Event Log pour consulter les événements du système, y compris les erreurs et les avertissements. Consultez le document : <i>Guide du directeur de laboratoire</i> .
<b>Audit Trail</b>	(Suivi d'audit) Utilisez l'espace de travail Audit Trail pour afficher les enregistrements des événements logiciels, tels que les modifications apportées à la configuration et le traitement des données. Consultez le document : <i>Guide du directeur de laboratoire</i> .

## À propos du ruban et du lanceur

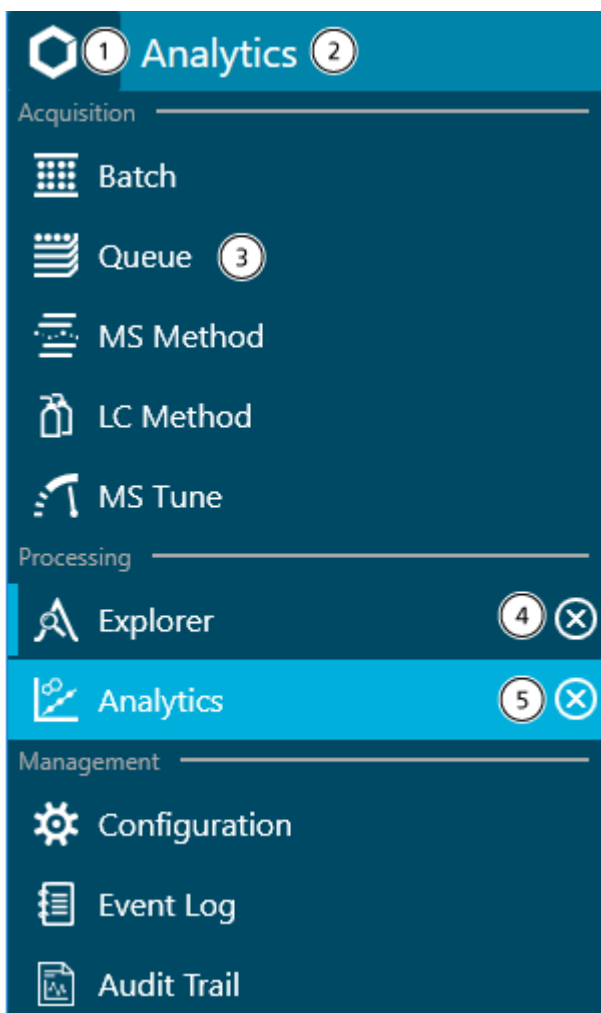
Illustration 1-2 : Ruban






Élément	Description
1	Permet d'ouvrir un autre espace de travail en le sélectionnant dans la liste. Cet espace de travail devient l'espace de travail actif. L'espace de travail qui était actif auparavant reste ouvert. Voir la figure : <a href="#">Illustration 1-3</a>
2	Affiche le nom de l'espace de travail actif.
3	Ouvre la page d'accueil.
4	Affiche les espaces de travail ouverts. L'espace de travail actif apparaît en blanc. Pour qu'un espace de travail ouvert devienne actif, cliquez sur l'icône de l'espace de travail.
5	Affiche l'utilisateur actuellement connecté.
6	Indique le statut du système. Consulter la section : <a href="#">À propos du panneau d'état</a>
7	Ouvre le système d'aide. Cliquez sur ?.



Illustration 1-3 : Lanceur



Élément	Description
1	Affiche la liste des espaces de travail. Cliquez sur  .
2	Affiche le nom de l'espace de travail actif.
3	Affiche le statut des espaces de travail. Un fond bleu foncé indique que l'espace de travail est fermé. Une barre verticale bleu clair sur la gauche indique que l'espace de travail est ouvert. Un fond bleu clair indique que l'espace de travail est actif.
4	Ferme un espace de travail ouvert. Cliquez sur  .
5	Ferme l'espace de travail actif. Cliquez sur  .

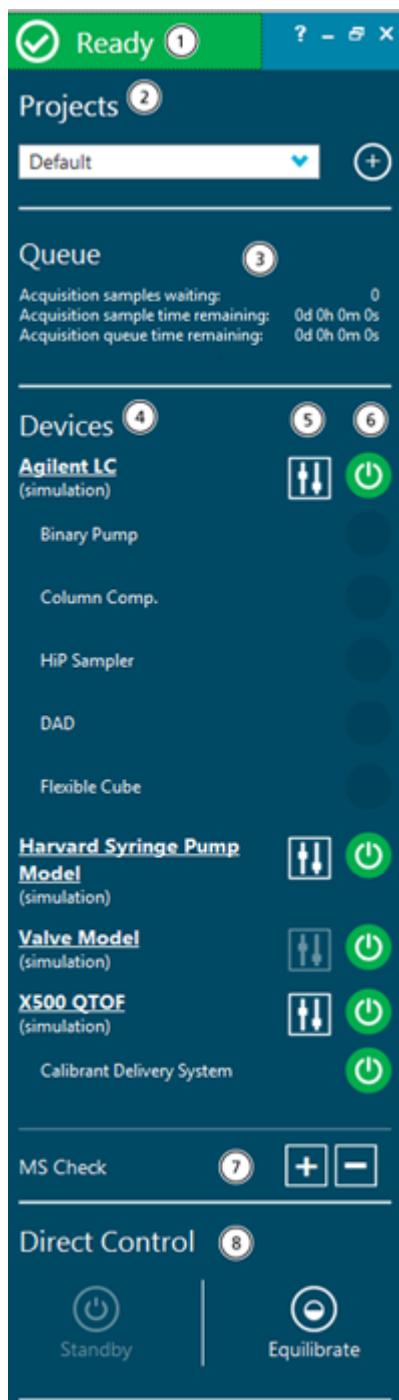
### À propos du panneau d'état

Pour ouvrir ce panneau, cliquez sur la barre de titre du panneau d'état. Voir la figure : [Illustration 1-2](#)

L'icône, le texte et la couleur de la barre de titre d'état changent en fonction de l'état du système. Le panneau d'état permet d'effectuer les tâches suivantes :


- Ajouter ou sélectionner un projet
- Afficher les échantillons restants dans la file d'attente et le temps estimé restant pour l'acquisition du lot.
- Afficher le nombre d'échantillons restants dans la file d'attente et le temps estimé restant jusqu'à la fin de la file d'attente.
- Afficher l'état du système ou celui des appareils individuels qui ont été activés dans la liste Devices de l'espace de travail Configuration.
- Accéder au contrôle direct de l'appareil pour démarrer ou arrêter des appareils.
- Afficher les détails de l'appareil.
- Placer le spectromètre de masse ou le système LC en mode Standby.
- Vérifier et étalonner les modes TOF MS et TOF MS/MS.
- Équilibrer le système.

Illustration 1-4 : Panneau d'état du logiciel SCIEX OS



## Introduction

---

Élément	Description
1	Affiche l'état du système. Cliquez sur la barre de titre pour afficher ou masquer le panneau d'état. <ul style="list-style-type: none"><li>• Ready est indiqué par la couleur verte.</li><li>• Offline est indiqué par la couleur grise.</li><li>• Equilibrating, Running et Loading sont indiqués par la couleur bleue.</li><li>• Stopped et Stopping sont indiqués par la couleur jaune.</li><li>• Fault est indiqué par la couleur rouge.</li></ul>
2	Affiche le projet en cours. Pour modifier un projet existant, sélectionnez-le dans la liste. Pour ajouter un projet, cliquez sur <b>Create Project</b> (  ) , saisissez le nom du projet et cliquez sur <b>OK</b> .
3	Affiche l'état des échantillons dans la file d'attente.
4	Affiche l'état des appareils. Cliquez sur le titre de l'appareil pour ouvrir la boîte de dialogue Device Details et afficher les détails. Si les appareils sont inactifs, le bouton <b>Activate Devices</b> apparaît dans cette section du panneau d'état. Cliquez sur ce bouton pour activer les appareils.
5	Cliquez sur l'icône <b>Direct Device Control</b> pour accéder aux commandes de l'appareil. Vous pouvez démarrer ou arrêter la seringue en option dans la boîte de dialogue Device Control.
6	Affiche l'état de l'appareil. L'icône n'est qu'un indicateur d'affichage de l'état de l'appareil.
7	Cliquez pour accéder aux procédures MS Tune.
8	Cliquez sur le bouton approprié pour équilibrer le système ou passer en veille. Consulter la section : <a href="#">Équilibrer le système</a>

**Tableau 1-3 : Sections du panneau d'état**


Libellé	Description
<b>Projects</b>	(Projets) Affiche le projet en cours. Cliquez sur <b>Create Project</b> (  ) pour créer un projet. Consultez la section <a href="#">Ajouter un projet</a> .

Tableau 1-3 : Sections du panneau d'état (suite)




Libellé	Description
<b>Queue</b>	<p>(File d'attente) Affiche l'état des échantillons dans la file d'attente. Des informations sont fournies pour :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Samples waiting</b> (Échantillons en attente)</li> <li>• <b>Sample time remaining</b> (Temps d'échantillon restant)</li> <li>• <b>Acquisition time remaining</b> (Temps d'acquisition restant)</li> </ul> <p>Consulter la section : <a href="#">Gérer la file d'attente</a></p>
<b>Devices</b>	<p>(Appareils) Répertorie les appareils dans la configuration active. Dans cette liste, il existe plusieurs manières de gérer les appareils :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Cliquez sur le nom de l'appareil pour ouvrir et afficher la boîte de dialogue Device Details.</li> <li>• Affichez l'état de l'icône ou déplacez le curseur sur l'icône d'état pour afficher l'état de l'appareil.</li> <li>• Cliquez sur <b>Direct device control</b> () pour ouvrir la boîte de dialogue Device Control.</li> </ul>
<b>MS Check</b>	<p>(Contrôle MS) Réalise la procédure de réglage MS en mode Positif (+) ou Négatif (-).</p>
<b>Direct Control</b>	<p>(Contrôle direct) Permet à l'utilisateur de contrôler l'appareil manuellement. Cliquez sur <b>Standby</b> pour mettre le système en veille. Cliquez sur <b>Equilibrate</b> pour ouvrir la boîte de dialogue Equilibrate. Consulter la section : <a href="#">Équilibrer le système</a></p>

Tableau 1-4 : Fonctions du panneau d'état

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Afficher le panneau d'état	Cliquez sur la barre de titre du panneau d'état, en haut du panneau d'état réduit. Voir la figure : <a href="#">Illustration 1-2</a>
Masquer le panneau d'état	Cliquez sur la barre de titre du panneau d'état lorsqu'elle apparaît.
Modifier le projet actif	<p>Sélectionnez un projet dans la liste <b>Projects</b> dans le panneau d'état.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Cliquez sur <b>Create Project</b> () pour créer un projet. Saisissez le nom du projet et cliquez sur <b>OK</b>.</p> <hr/>

**Tableau 1-4 : Fonctions du panneau d'état (suite)**

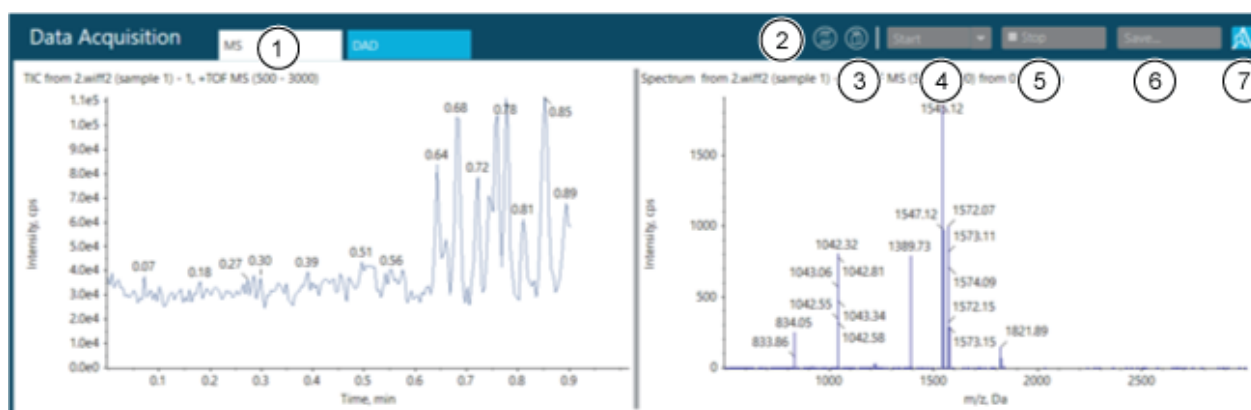
Pour faire ceci	Procédez comme suit
Contrôler l'état de l'appareil	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dans le panneau d'état, cliquez sur <b>Direct device control</b>  à droite du titre de l'appareil. La boîte de dialogue Device Control s'ouvre.</li> <li>2. Démarrez, arrêtez ou mettez à jour l'appareil selon les besoins.</li> <li>3. Cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol> <p>Cette procédure permet d'obtenir des informations plus détaillées à propos de l'état d'un appareil. Par exemple, les températures, les pressions et les tensions. Pour surveiller l'état de l'appareil, cliquez sur l'icône à l'extrême droite du titre de l'appareil.</p>

## Volet Data Acquisition

Utilisez le volet Data Acquisition pour lancer et surveiller l'acquisition des données en temps réel. Les utilisateurs peuvent également modifier les paramètres de la méthode d'acquisition pendant l'acquisition de données en temps réel, mais aussi enregistrer ou ouvrir des données dans l'espace de travail Explorer.

**Conseil !** Cliquez en haut du volet Data Acquisition, puis faites-le glisser vers le haut ou vers le bas pour redimensionner le contenu.

**Illustration 1-5 : Volet Data Acquisition**



Élément	Description
1	Affiche le TIC et le spectre ou XIC. Si un détecteur est actif, les données DAD ou UV apparaissent également.

---

Élément	Description
2	méthode MS. Utilisez le curseur de la souris pour afficher le nom de la méthode MS en cours d'exécution.
3	Méthode LC. Utilisez le curseur de la souris pour afficher le nom de la méthode LC en cours d'exécution.
4	Cliquez sur <b>Start</b> pour lancer l'acquisition manuelle. Cliquez sur <b>Start &gt; Start with LC</b> pour ouvrir la boîte de dialogue Start with LC.
5	Cliquez ici pour arrêter l'acquisition manuelle.
6	Cliquez ici pour enregistrer les données.
7	Cliquez ici pour explorer les données en temps réel.

## Verrouiller l'écran

Verrouillez le logiciel pour empêcher tout accès non autorisé au logiciel lorsque le poste de travail est laissé sans surveillance. Pendant que le logiciel est verrouillé, tout traitement ou acquisition en cours continue.

Lorsque le délai de déconnexion automatique expire, l'utilisateur est déconnecté. L'acquisition se poursuit.

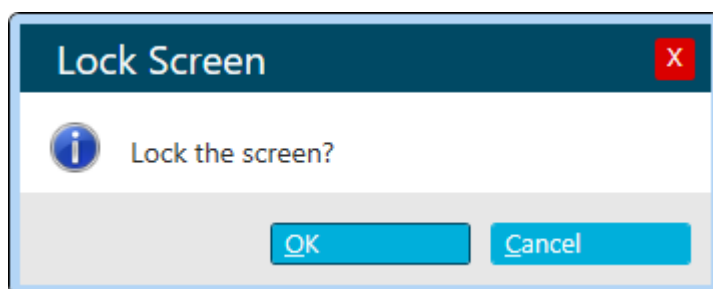
---

**Remarque** : Il n'y a pas de déconnexion si un traitement est en cours ni si le Results Table n'a pas été sauvegardé.

---

1. Appuyez sur **Ctrl+Q**.

### Illustration 1-6 : Boîte de dialogue Lock Screen



2. Cliquez sur **OK**.  
La boîte de dialogue SCIEX OS is Locked apparaît.

## Déverrouillez le logiciel

Si le logiciel est verrouillé, l'utilisateur actuellement connecté peut le déverrouiller.

---

**Remarque** : Les autres utilisateurs ne peuvent pas déverrouiller le logiciel, mais un utilisateur avec l'autorisation **Force User Logoff** peut déconnecter l'utilisateur actuel.

---

## Introduction

---

Dans la boîte de dialogue SCIEX OS is Locked, saisissez le mot de passe pour l'utilisateur actuel puis cliquez sur **Unlock**.

# Assistance de cahier de laboratoire électronique

SCIEX ne prend en charge aucune solution de cahier de laboratoire électronique (ELN) spécifique, mais SCIEX propose des produits, outils et services pour faciliter l'importation et l'exportation de données à intégrer avec des systèmes d'ELN :

- **Batch Creation** : SCIEX OS peut importer des fichiers par lots au format csv ou txt. Voir [Espace de travail Batch](#).
- **Results Upload** : SCIEX OS peut exporter des données vers un fichier txt à utiliser dans un système LIMS. Voir [Espace de travail Analytics](#).

## Symboles et conventions de la documentation

Les symboles et conventions suivants sont utilisés tout au long de ce guide.



---

**DANGER ! Danger signifie une action qui entraîne des blessures graves ou la mort.**

---



---

**AVERTISSEMENT ! Un avertissement indique une action qui pourrait causer des blessures si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.**

---

---

**ATTENTION : attention signifie une opération susceptible d'endommager le système ou de conduire à une perte ou une altération de données si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.**

---

---

**Remarque** : une remarque souligne une information importante dans une procédure ou une description.

---

---

**Conseil !** Un conseil fournit une information utile pour mettre en application les techniques et les procédures du texte pour un besoin spécifique et fournit des raccourcis, mais n'est pas indispensable à la réalisation de la procédure.

---



# Instructions d'utilisation — Configuration de l'appareil

# 2

Utilisez l'espace de travail Configuration pour :

- Activer et désactiver des appareils
- Ajouter et supprimer des appareils
- Modifier les paramètres des appareils
- Tester les appareils

## Ajouter des appareils

**Remarque** : Pour éviter tout problème d'activation, ajoutez toujours le spectromètre de masse avant d'ajouter tout autre périphérique.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Devices**.
3. Si des appareils sont actifs, cliquez sur **Deactivate**.
4. Cliquez sur **Add**.  
La boîte de dialogue Device s'ouvre.
5. Dans la liste **Type**, sélectionnez le type requis.
6. Dans la liste **Model**, sélectionnez le modèle requis.
7. Cliquez sur **Settings** pour modifier les paramètres ou rétablir les valeurs par défaut.
8. Cliquez sur **Test Device** pour vérifier que l'appareil est correctement configuré et prêt à être utilisé.
9. Cliquez sur **Save**.
10. Répétez les étapes 4 à 9 selon les besoins.
11. Cochez la case **Activate** située à côté de chaque appareil devant être activé, puis cliquez sur **Activate Devices**.  
Tous les appareils sélectionnés sont activés.
12. Pour éditer ou supprimer des appareils, consultez le système d'aide.

## Supprimer des appareils

**Remarque** : Si l'appareil qui va être supprimé fait partie d'un système intégré, alors tous les appareils de ce système intégré sont supprimés. Les utilisateurs ne peuvent pas supprimer un appareil dans un système intégré.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Devices**.
3. Cliquez sur **Deactivate**.
4. Sélectionnez un appareil.
5. Cliquez sur **Delete**.
6. Cochez la case **Activate** située à côté de chaque appareil devant être activé, puis cliquez sur **Activate Devices**.  
Tous les appareils sélectionnés sont activés.

## Modifier les paramètres de l'appareil

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Devices**.
3. Si les appareils sont actifs, cliquez sur **Deactivate**.
4. Sélectionnez l'appareil à éditer.
5. Cliquez sur **Edit**.  
La boîte de dialogue Device s'ouvre.
6. (Facultatif) Modifiez les propriétés des appareils dans la section **Device Display Names**. Pour des informations sur les propriétés, consultez le document : *Système d'aide*.
7. (Facultatif) Cliquez sur **Settings** pour afficher et modifier des informations supplémentaires sur les périphériques. Utilisez la boîte de dialogue Settings pour réaliser les tâches suivantes :
  - Cliquez sur **Restore Defaults** pour restaurer les paramètres par défaut pour l'appareil.
  - Cliquez sur **Test Device** pour vérifier que l'appareil est correctement configuré et prêt à être utilisé. Si le test réussit, la boîte de dialogue Settings se ferme.
8. Cliquez sur **Test Device** pour vérifier que l'appareil est correctement configuré et prêt à être utilisé.  
Si le test est réussi, un message vert apparaît. Sinon, un message indique que la configuration n'est pas valide et qu'elle doit être mise à jour.
9. Cliquez sur **Save**.
10. Cochez la case **Activate** située à côté de chaque appareil devant être activé, puis cliquez sur **Activate Devices**.  
Tous les appareils sélectionnés sont activés.

Pour plus d'informations sur la configuration des utilisateurs et des rôles, reportez-vous au document : *Guide du directeur de laboratoire*.

## À propos des projets et des répertoires racines

Un répertoire racine est un dossier contenant un ou plusieurs projets. C'est le dossier dans lequel le logiciel recherche des données du projet. Le répertoire racine prédéfini est `C:\SCIEX OS Data`.

Pour vous assurer que les informations relatives au projet sont stockées en toute sécurité, créez des projets avec SCIEX OS. Consulter la section : [Ajouter un projet](#).

Les données de projet peuvent être organisées en sous-dossiers. Créez les sous-dossiers avec SCIEX OS. Consulter la section : [Ajouter un sous-dossier](#).

---

**Remarque** : Dans les groupes de travail administrés par le logiciel Central Administrator Console (CAC), la configuration du logiciel CAC contrôle la possibilité de gérer des projets avec SCIEX OS. Si l'option **Use central settings for projects** est sélectionnée dans le logiciel CAC, la page Projects est en lecture seule.

---


## Ajouter un répertoire racine

Le répertoire racine est le dossier dans lequel un ou plusieurs projets sont stockés.

---

**Remarque** : Le logiciel sauvegarde jusqu'à dix répertoires racines.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Projects**.
3. Dans la section **Advanced**, cliquez sur **Create Root** (  ) à côté du champ **Current root directory**.
4. Saisissez le chemin complet du dossier du répertoire racine.  
Le dossier est créé.

---

**Conseil** ! Au lieu de saisir le chemin, cliquez sur **Browse**, puis sélectionnez le dossier dans lequel le répertoire racine sera créé. Saisissez « \ », puis le nom du dossier du répertoire racine à la fin du chemin.

---

---

**Conseil** ! Vous pouvez aussi créer un dossier dans l'explorateur de fichiers, puis naviguer jusqu'à ce dossier et le sélectionner.

---

**Remarque :** Pour les installations SCIEX OS avec une licence de traitement, le répertoire racine peut être un dossier du logiciel `Analyst Analyst Data\Projects`.

---


5. Cliquez sur **OK**.  
Le nouveau répertoire racine devient le répertoire racine du projet actuel.

## Supprimer un répertoire racine

Le logiciel maintient une liste d'au moins les dix derniers répertoires racines utilisés. L'utilisateur peut retirer des répertoires racines de cette liste.

**Remarque :** Le **Current root directory** ne peut pas être supprimé.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Projects**.
3. Dans la section **Advanced**, cliquez sur  à côté du champ **Current root directory**. La boîte de dialogue Clear Root Directory apparaît.
4. Sélectionnez les dossiers à retirer de la liste de répertoires racines, puis cliquez sur **OK**.

## Spécifier un compte réseau sécurisé


Si des projets sont stockés sur une ressource réseau, un compte réseau sécurisé (SNA) peut être spécifié pour s'assurer que tous les utilisateurs du poste de travail disposent des droits d'accès requis pour cette ressource.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Projects**.
3. Dans la section **Advanced**, cliquez sur **Credentials for Secure Network Account**.
4. Saisissez le nom d'utilisateur, le mot de passe et le domaine du compte réseau sécurisé défini sur la ressource réseau.
5. Cliquez sur **OK**.

## Ajouter un projet

Le projet conserve les méthodes d'acquisition, les données, les lots, les méthodes de traitement, les résultats de traitement, etc. Nous recommandons d'utiliser des dossiers de projet distincts pour chaque projet.

**Conseil !** Il est également possible de créer des projets en cliquant sur **Create Project**

(  ) sur le panneau d'état.

---


Ne créez pas de projets et ne copiez pas ou ne collez pas de fichiers en dehors de SCIEX OS.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
-

2. Cliquez sur **Projects**.
3. Cliquez sur **Create Project** (  ) à côté du champ **Current Project**.  
La boîte de dialogue New Project apparaît.
4. Saisissez le nom du projet.
5. Cliquez sur **OK**.

## Ajouter un sous-dossier

Dans les projets, les données peuvent ensuite être organisées en sous-dossiers.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Projects**.
3. Cliquez sur **Add Data Sub-Folders to any Project**.  
La boîte de dialogue Add Data Sub-Folders apparaît.
4. Dans le champ **SCIEX OS Project**, sélectionnez le projet dans lequel le sous-dossier doit être ajouté.
5. Cliquez sur **Add a new data sub-folder** (  ) au-dessus de la zone dans la section **Project Data Sub-Folders**.  
La boîte de dialogue Data Sub-Folder Name s'ouvre.
6. Saisissez le nom du sous-dossier.
7. Cliquez sur **Save**.
8. Fermez la boîte de dialogue Add Data Sub-Folders.

## Sélectionner les options de file d'attente

Le logiciel traite les échantillons soumis dans la liste les uns après les autres, en exécutant chaque échantillon avec la méthode d'acquisition sélectionnée. Après que tous les échantillons ont été acquis, la file d'attente s'arrête et le système passe à l'état Ready. Après que le temps défini dans le champ Instrument Idle Time est écoulé, le système passe à l'état Standby. À l'état Standby, les pompes LC et le four à colonne sont mis hors tension ainsi que certaines tensions du spectromètre de masse. La commande de température de l'auto-échantillonneur reste sous tension pour empêcher la dégradation de l'échantillon.

Seul un utilisateur auquel ont été assignées des autorisations de gestion de la file d'attente peut modifier le temps d'exécution de la file d'attente après que la dernière acquisition a été faite avant de mettre l'instrument à l'état Standby.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **Queue**.
3. Sélectionnez les options de file d'attente, selon vos besoins. Pour des descriptions des options, consultez le document : *Système d'aide*.

4. Cliquez sur **Save**.

## Sélectionner les paramètres du LIMS (Laboratory Information Management System)

Utilisez cette fonction pour vous connecter à un serveur LIMS. Les utilisateurs peuvent importer des informations sur les lots à partir d'un LIS et exporter des résultats vers un LIMS.

---

**Remarque** : Cette procédure n'est pas requise pour la connexion à un LIMS Watson.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **LIMS Communication**.
3. Pour communiquer avec un LIMS, saisissez l'URL du serveur LIMS dans le champ **LIMS Server**, puis sélectionnez **Enable import from the specified LIMS server**.

---

**Remarque** : Le service informatique du client ou le fournisseur d'intergiciels est responsable de la configuration du serveur LIMS. Contactez-les pour connaître l'URL ou l'emplacement du serveur.

---

4. Cliquez sur **Save**.

## Activer le mode Plein écran

Sélectionnez cette option pour utiliser SCIEX OS en tant qu'application principale. Les utilisateurs ne peuvent pas fermer le logiciel ou accéder à d'autres programmes.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **General**.
3. Sous **General**, cochez la case **Enabled** pour activer **Full Screen Mode**.
4. Cliquez sur **Save**.

## Sélectionner les paramètres régionaux

Cette fonction applique les paramètres régionaux et de langue sélectionnés dans le panneau de configuration. Seul un point "." ou une virgule « , » peuvent être utilisés comme séparateurs décimaux. Les regroupements de chiffres ne sont pas pris en charge.

1. Ouvrez l'espace de travail Configuration.
2. Cliquez sur **General**.
3. Sous **Regional Settings**, cliquez sur **Apply**.  
Les paramètres régionaux configurés dans le système d'exploitation Windows sont appliqués au logiciel une fois que l'ordinateur a été redémarré.
4. Cliquez sur **Save**.
5. Redémarrez l'ordinateur.

## Gérer les bibliothèques de composés

### Importer un progiciel LibraryView

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Cliquez sur **LibraryView Package (\*.lbp)** dans la boîte de dialogue Library Importer.
5. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
6. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.
7. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** pour importer tous les composés.
  - Cliquez dans la ligne appropriée pour importer des composés individuels.

---

**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Sélectionnez la bibliothèque appropriée à partir de la liste **Add to Compound Library**.
  - Saisissez le nom de la bibliothèque dans le champ de la liste **Add to Compound Library**.
9. Cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

10. Réglez les conflits, si nécessaire.
11. Cliquez sur **Finish**.

### Importer une base de données de composés

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **DiscoveryQuant Compound Database (\*.mdb)**.

- Cliquez sur **Analyst Compound Database (\*.mdb)**.
5. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
  6. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.
  7. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
    - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** pour importer tous les composés.
    - Cliquez dans la ligne appropriée pour importer des composés individuels.

---

**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Sélectionnez la bibliothèque appropriée à partir de la liste **Add to Compound Library**.
  - Saisissez le nom de la bibliothèque dans le champ de la liste **Add to Compound Library**.
9. Cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

10. Réglez les conflits, si nécessaire.
11. Cliquez sur **Finish**.

## Importer un progiciel Cliquid

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Cliquez sur **Cliquid Package (\*.clq)** dans la boîte de dialogue Library Importer.
5. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
6. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.
7. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** pour importer tous les composés.
  - Cliquez dans la ligne appropriée pour importer des composés individuels.



**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Sélectionnez la bibliothèque appropriée à partir de la liste **Add to Compound Library**.
  - Saisissez le nom de la bibliothèque dans le champ de la liste **Add to Compound Library**.
9. Cliquez sur **Next**.
10. Le cas échéant, saisissez le nom du spectromètre de masse dans le champ **Instrument Name** dans la boîte de dialogue Instrument Name.
11. Cliquez sur **OK**.

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

12. Réglez les conflits, si nécessaire.
13. Cliquez sur **Finish**.

## Importer un fichier Excel

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Cliquez sur **Excel file (\*.xls)** dans la boîte de dialogue Library Importer.
5. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
6. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.
7. Sélectionnez la **Excel worksheet to import** appropriée dans la boîte de dialogue Library Importer.
8. Si la feuille de calcul contient des en-têtes de colonnes, cochez alors la case en regard de **Selected Excel Worksheet has headers**.
9. Le cas échéant, saisissez le nom du spectromètre de masse dans le champ **Instrument Name** dans la boîte de dialogue Instrument Name.
10. Sélectionnez l'en-tête approprié pour chaque colonne d'informations.

**Conseil !** **Compound:CompoundId** et **Compound:Name** sont des sélections obligatoires. Sélectionnez **---[not used]---** pour des informations qui ne sont pas requises.

---

11. Cliquez sur **Next**.
12. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** pour importer tous les composés.
  - Cliquez dans la ligne appropriée pour importer des composés individuels.

---

**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

13. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Sélectionnez la bibliothèque appropriée à partir de la liste **Add to Compound Library**.
  - Saisissez le nom de la bibliothèque dans le champ de la liste **Add to Compound Library**.
14. Cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

15. Réglez les conflits, si nécessaire.
16. Cliquez sur **Finish**.

## Importer un instantané de la base de données de la bibliothèque

---

**ATTENTION : Risque de perte de données. Sauvegardez la base de données du logiciel LibraryView actuelle avant de réaliser cette procédure. Les informations de ce logiciel écrasent toutes les données existantes dans la base de données du logiciel LibraryView. L'option Cancel n'est pas disponible une fois que l'importation commence.**

---

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Cliquez sur **Overwrite Database with Library Snapshot (\*.lbp)** dans la boîte de dialogue Library Importer.
5. Cliquez sur **Yes** dans la boîte de dialogue Warning.
6. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
7. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.

8. Cliquez sur **Finish**.

## Importer un progiciel de bibliothèque d'un tiers

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Import**.
4. Cliquez sur **Third Party Library Package (\*.tulp)** dans la boîte de dialogue Library Importer.
5. Dans la boîte de dialogue Open, accédez au fichier approprié.
6. Sélectionnez le fichier, puis cliquez sur **Open**.
7. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** pour importer tous les composés.
  - Cliquez dans la ligne appropriée pour importer des composés individuels.

---

**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Sélectionnez la bibliothèque appropriée à partir de la liste **Add to Compound Library**.
  - Saisissez le nom de la bibliothèque dans le champ de la liste **Add to Compound Library**.
9. Cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

10. Réglez les conflits, si nécessaire.
11. Cliquez sur **Finish**.

## Installer un progiciel LibraryView sous licence

---

**Remarque :** Le logiciel LibraryView doit être installé.

---

---

**Remarque :** Il faut disposer d'un accès à Internet pour pouvoir obtenir une licence pour le logiciel LibraryView. Si un ordinateur ne dispose pas d'un accès Internet, faites une copie de l'ID d'ordinateur généré. Sur un ordinateur disposant d'un accès Internet, allez à la page d'octroi de licences du site Web SCIEX, puis suivez les instructions pour obtenir la licence.

---

## Instructions d'utilisation — Configuration logicielle

---

Une bibliothèque sous licence peut être installée à partir d'un DVD ou d'un fichier d'application .zip téléchargé sur le site Web SCIEX. Le fichier d'application peut contenir des noms de composés, des informations de transition relatives aux composés et des spectres de bibliothèque de composés.

1. Se connecter sur l'ordinateur en tant qu'utilisateur de Windows possédant des privilèges d'administrateur.
2. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Si la bibliothèque est installée à partir d'un DVD, chargez le DVD dans le lecteur DVD et passez à l'étape 5.
  - Si la bibliothèque est installée à partir d'un fichier téléchargé, passez à l'étape 3.
3. Téléchargez le fichier .zip requis à partir du site Web SCIEX.

---

**Conseil !** Afin d'éviter d'éventuels problèmes d'installation, enregistrez le fichier dans un emplacement autre que le bureau de l'ordinateur.

---

4. Une fois le téléchargement terminé, cliquez avec le bouton droit sur le fichier téléchargé, puis cliquez sur **Extract All**.
5. Accédez aux fichiers extraits ou au DVD, puis double-cliquez sur **Library.exe**.

---

**Conseil !** Si la boîte de dialogue User Account Control s'ouvre, cliquez sur **Yes**.

---

**Conseil !** Si la boîte de dialogue comportant le message LibraryView Setup (Not Responding) apparaît, fermez-la, cliquez avec le bouton droit sur le fichier **Library.exe** et sélectionnez l'option **Run as administrator** pour recommencer l'installation.

---

6. Cliquez sur **Software Activation** dans la boîte de dialogue LibraryViewPackages Feature Unavailable.  
La boîte de dialogue LibraryViewPackages Activation s'ouvre.
7. Saisissez la clé de licence exactement comme indiqué dans le champ adéquat.  
Si aucune clé de licence n'est disponible, contactez [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support).
8. Cliquez sur **Generate Computer ID**.  
Un identifiant unique est créé pour le poste de travail.
9. Cliquez sur **Copy ID to Clipboard**.
10. Suivez les instructions pour obtenir la licence.

Une fois toutes les informations renseignées, un fichier de licence est envoyé à toutes les adresses e-mail fournies.

11. Fermer la fenêtre du navigateur.
12. Une fois l'e-mail contenant le fichier de licence reçu, copiez le fichier de licence sur le bureau du poste de travail.
13. Cliquez sur **Install License File** dans la boîte de dialogue LibraryViewPackages Activation.

14. Naviguez vers le fichier de licence, puis sélectionnez-le dans la boîte de dialogue Select the new license file to be installed.
15. Cliquer sur **Open**.  
Les boîtes de dialogue Select the new license file to be installed et LibraryViewPackage Activation se ferment.
16. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Cliquez sur **All** au-dessus de la colonne **Compound** dans la boîte de dialogue Library Importer pour importer tous les composés.
  - Cliquez à l'intérieur de la ligne appropriée dans la boîte de dialogue Library Importer pour importer des composés individuels.

---

**Conseil !** Pour repérer facilement des composés, utilisez le champ **Search**. Lorsque les critères de recherche sont saisis, les colonnes visibles sont explorées et actualisées pour ne montrer que les informations qui correspondent aux critères spécifiés.

---

17. Cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur annule l'importation avant que tous les composés n'aient été copiés dans la base de données, ceux qui ont déjà été importés y sont alors conservés. Le logiciel ne restaurera pas la base de données à l'état avant importation.

---

18. Résolvez les conflits, si nécessaire.

19. Cliquez sur **Finish**.

## Conflits entre des composés

Lors de l'installation d'une bibliothèque contenant un groupe de composés ou de l'installation de composés individuels, le logiciel recherche dans la base de données des composés du même nom ou de la même formule que les composés du package. Si le logiciel trouve des composés, il marque alors les composés correspondants dans le progiciel et attend une action de l'utilisateur pour continuer.

Les utilisateurs peuvent :

- Fusionner les informations des composés. Les nouveaux spectres, les transitions et les pointes de retenue du composé dans le progiciel sont ajoutés aux informations du composé qui sont stockées dans la base de données.
- Écraser les informations du composé. Les informations du composé provenant du progiciel remplacent les informations du composé qui sont stockées dans la base de données.
- Conserver les informations des composés. Les informations du composé contenues dans la base de données sont conservées et les informations du composé provenant du progiciel sont supprimées.

Les informations relatives aux conflits sont disponibles et aident l'utilisateur à prendre les décisions adéquates.

### Afficher les conflits de composés

1. Cliquez sur **Resolve** à côté du composé dans la boîte de dialogue Library Importer pour afficher les détails du conflit.
2. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour conserver les informations existantes sur le composé et annuler les nouvelles informations, cliquez sur **Keep Original**.
  - Pour remplacer les informations existantes sur le composé par les nouvelles informations, cliquez sur **Use New**.
3. Répétez les étapes 1 et 2 pour chaque composé.
4. Une fois tous les conflits résolus, cliquez sur **Finish**.

### Fusionner des composés

1. Dans la boîte de dialogue Library Importer, procédez comme suit :
  - Cliquez sur **Merge** pour fusionner les nouveaux spectres, les transitions et les temps de rétention, associés à des composés individuels du package d'importation, avec les informations relatives aux composés correspondants stockées dans la base de données.
  - Cliquez sur **Merge All** pour fusionner les nouveaux spectres, les transitions et les temps de rétention de tous les composés du package d'importation avec les informations relatives aux composés correspondants stockées dans la base de données.
2. Une fois tous les conflits résolus, cliquez sur **Finish**.

### Écraser des composés

1. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **Overwrite All** pour écraser toutes les informations relatives aux composés, stockées dans la base de données, ainsi que les informations correspondantes provenant du package d'importation.
  - Cliquez sur **Resolve** en regard du composé approprié, puis cliquez sur **Use New** pour écraser les informations relatives aux composés, stockées dans la base de données, avec les informations correspondantes provenant du package d'importation.
2. Cliquez sur **Finish** après la résolution de tous les conflits.

### Conserver les composés originaux

1. Effectuez l'une des actions suivantes dans la boîte de dialogue Library Importer :
  - Cliquez sur **Keep All Original** pour conserver toutes les informations relatives aux composés stockées dans la base de données et annuler les informations relatives aux composés provenant du package d'importation.

- Cliquez sur **Keep Original** à côté du composé adéquat pour conserver les informations relatives aux composés stockés dans la base de données et annuler les informations sur les composés provenant du package d'importation.
2. Cliquez sur **Finish** après la résolution de tous les conflits.

### Ajouter un composé

---

**Remarque** : Les composés peuvent également être ajoutés à la bibliothèque à l'aide de l'option **Edit Library**.

---

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Cliquez sur l'icône **Add**.

---

**Remarque** : Le nom du composé est obligatoire. Toutes les autres informations sont facultatives.

---

4. Saisissez les informations appropriées dans les champs de l'onglet Details.
5. Cliquez sur **Save**.

### Ajouter un spectre de masse à un composé

1. Développez la liste **Compounds** dans le volet Manage.
2. Cliquez sur **All Compounds**.
3. Double-cliquez sur le composé approprié.
4. Cliquez sur l'onglet **MS Spectra**.
5. Cliquez sur l'icône **Edit Mode**.
6. Cliquez sur l'icône **Add Spectra**.
7. Cliquez sur **Open \*.wiff file** dans la boîte de dialogue Add Mass Spectrum from \*.wiff file to Compound.
8. Recherchez, puis sélectionnez le fichier .wiff ou .wiff2 approprié dans la boîte de dialogue Open.
9. Cliquez sur **Open**.
10. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter les composés à une bibliothèque :
  - Pour les données IDA, développez l'échantillon, puis sélectionnez le composé approprié dans le volet de navigation de gauche.
  - Pour les données EMS, MRM et en boucle, sélectionnez l'échantillon approprié.
11. Effectuez l'une des opérations suivantes pour ajouter le spectre au composé :
  - Pour les données IDA, cliquez sur **Add Spectrum** dans le volet Acquired Spectrum.

- Pour les données EMS, MRM et en boucle, double-cliquez sur le TIC, puis cliquez sur **Add Spectrum** dans le volet Acquired Spectrum.
12. Répétez les étapes 7 à 11 pour chaque spectre à ajouter.
  13. Cliquez sur **Save**.
  14. Cliquez sur **Save** dans l'onglet MS Spectra.



# Instructions d'utilisation— Processus utilisateur

# 4

## Analystes

Tâche	Voir
Afficher l'écran principal et le panneau d'état pour vérifier l'état du système.	<a href="#">À propos de la page d'accueil</a> et <a href="#">À propos du panneau d'état</a> .
Créer et soumettre un lot en utilisant une feuille de calcul Microsoft Excel ou le LIMS, ou manuellement. Les méthodes LC et MS doivent être verrouillées par des développeurs de méthode avant la création et la soumission de lots par les analystes.	<a href="#">Espace de travail Batch</a> .
Afficher et gérer les échantillons de la file d'attente.	<a href="#">Espace de travail Queue</a> .
Traiter et examiner les données dans les tableaux de résultats.	<a href="#">Espace de travail Analytics</a> .
Explorer les données.	<a href="#">Espace de travail Explorer</a> .

## Développeurs de méthodes

Tâche	Voir
Configurer le système.	<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Instructions d'utilisation — Configuration de l'appareil</a>.</li><li>• <a href="#">Définir les paramètres de traitement par défaut pour le projet</a>.</li><li>• <a href="#">Personnaliser le tableau de résultats</a>.</li></ul>
Régler le spectromètre de masse.	<a href="#">Espace de travail MS Tune</a> .
Configurer les appareils de chromatographie liquide (LC).	La documentation pour l'appareil LC.
Créer des méthodes LC.	<a href="#">Créer une méthode LC</a> .
Créer des méthodes de spectrométrie de masse (MS).	<a href="#">Espace de travail MS Method</a> .

Tâche	Voir
Développer des méthodes de traitement.	<a href="#">Création d'une méthode de traitement.</a>

## Administrateurs

Tâche	Voir
Définir les autorisations sur les fichiers.	<i>Guide du directeur de laboratoire.</i>
Configurer le LIMS.	<a href="#">Sélectionner les paramètres du LIMS (Laboratory Information Management System).</a>
Ajouter des utilisateurs au logiciel et attribuer des rôles.	<i>Guide du directeur de laboratoire.</i>
Archiver les journaux.	<a href="#">Archiver les journaux.</a>

## Réviseurs

Tâche	Voir
Examiner les résultats traités.	<a href="#">Espace de travail Analytics.</a>
Explorer les données.	<a href="#">Espace de travail Explorer.</a>
Examiner les journaux.	<a href="#">Afficher les journaux.</a>

# Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

# 5

Utilisez les espaces de travail suivants pour réaliser des tâches d'acquisition :

- [Espace de travail MS Method](#) : Créer et gérer les méthodes MS
- [Espace de travail LC Method](#) : Créer et gérer des méthodes LC
- [Espace de travail Batch](#) : Créer des lots et les soumettre à la file d'attente
- [Espace de travail Queue](#) : Gérer des échantillons dans la file d'attente

---

**Remarque** : Afin d'éviter les problèmes de performance ou de corruption des données, ne réalisez aucune procédure de maintenance de votre ordinateur telle qu'une défragmentation, un nettoyage du disque, une recherche de virus ou des mises à jour Windows lors de l'acquisition d'échantillons.

---

## Espace de travail MS Method

Utilisez cet espace de travail pour créer et gérer des méthodes de spectromètre de masse (MS).

Plusieurs méthodes peuvent être ouvertes dans l'espace de travail MS Method. Le menu **Views** permet de transformer la disposition des fenêtres de méthodes en vues à onglets, flottantes ou avec une mosaïque verticale ou horizontale. Dans la vue flottante, les fenêtres peuvent être redimensionnées, agrandies, réduites, sorties de la fenêtre SCIEX OS ou affichées sur un autre écran.

La barre de titre de la fenêtre de méthode contient les noms des méthodes et des projets. Dans les vues en mosaïque et flottantes, la barre de titre de la méthode active est bleue et les barres de titres des autres méthodes sont grises. Dans la vue à onglets, l'onglet pour la méthode active est blanc et les onglets pour les autres méthodes sont bleus.

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

## Créer une méthode MS

Consultez la documentation suivante selon les besoins :

- [Expériences de méthodes MS](#)
- [À propos des méthodes MS](#)
- [Calculer l'énergie de collision dynamique pour les méthodes MS](#)

1. Ouvrez l'espace de travail **MS Methods**.
2. Cliquez sur **New**, puis sur une méthode.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

3. (Facultatif) Cliquez sur **Options**, puis sélectionnez les éléments suivants, selon les besoins :

**Tableau 5-1 : Menu Options**

<b>Paramètre</b>	<b>Description</b>
<b>Apply experiment scheduling</b>	(Appliquer un calendrier d'expériences) Sélectionnez cette option pour appliquer la fenêtre du temps de rétention lorsque des expériences doivent être réalisées. Pour les expériences en boucle, l'une des heures d'exécution initiales doit être égale à 0 et l'une des heures d'exécution finales doit être égale à la durée de la méthode.
<b>Apply ionization scheduling</b>	(Appliquer un calendrier d'ionisation) Permet d'afficher <b>Ionization start time</b> et <b>Ionization stop time</b> .
<b>Show EAD parameters</b>	(Afficher les paramètres EAD) (Systèmes ZenoTOF 7600) Sélectionnez pour afficher les paramètres EAD. Les champs suivants sont activés lorsque le mode de fragmentation EAD est utilisé et que cette option est sélectionnée : <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Fragmentation mode : EAD</b></li><li>• <b>Electron KE</b></li><li>• <b>ETC</b></li><li>• <b>Electron beam current</b></li><li>• <b>Load time</b></li><li>• <b>EAD RF</b></li><li>• <b>Reaction time</b></li></ul>
<b>Apply intact protein mode</b>	(Appliquer le mode de protéine intacte) (Systèmes X500 QTOF) Sélectionnez pour afficher les champs du mode de protéine intacte.

**Tableau 5-1 : Menu Options (suite)**

<b>Paramètre</b>	<b>Description</b>
<b>Ramp</b>	<p>(Incrémenter) Permet d'incrémenter les paramètres. La boîte de dialogue Ramp Compound Parameters apparaît.</p> <p>L'incrémenter peut être utilisée pour optimiser les paramètres pour les ions.</p> <p>L'incrémenter d'un paramètre consiste à lancer automatiquement une expérience lors de l'augmentation ou de la diminution de la valeur d'un paramètre. Un seul paramètre peut être incrémenté à la fois, et les étapes doivent être uniformes et dans le même sens, augmentation ou diminution dans la limite des valeurs initiales et finales. Les utilisateurs peuvent définir les tensions de début et de fin et la taille des étapes intermédiaires.</p> <p>Pour les méthodes TOF MS, les utilisateurs peuvent incrémenter le paramètre DP. Pour les méthodes TOF MSMS, les utilisateurs peuvent incrémenter le paramètre DP ou le paramètre CE. L'incrémenter peut être activée via la sélection de l'option Apply ramping to the compound parameter.</p>
<b>Calibrate</b>	<p>(Étalonner) Permet d'étalonner le spectre et le spectromètre de masse pendant l'acquisition. La boîte de dialogue Calibrate apparaît. Cette boîte de dialogue permet à l'utilisateur de sélectionner le tableau de référence des ions approprié pour l'étalonnage.</p> <p>La fonction d'étalonnage est généralement utilisée avec le système de fourniture de l'étalon (CDS). Pour afficher les résultats de l'étalonnage, les utilisateurs peuvent accéder à l'espace de travail Queue, puis double-cliquer sur l'icône de statut d'acquisition de l'étalonnage. L'étalonnage prend 1,25 min.</p>
<b>Dynamic collision energy</b>	(Énergie de collision dynamique) Cliquez pour ouvrir la boîte de dialogue Dynamic Collision Energy.
<b>Dynamic ETC</b>	(Systèmes ZenoTOF 7600) (ETC dynamique) Cliquez pour ouvrir la boîte de dialogue Dynamic ETC.

4. Saisissez les valeurs dans les champs, le cas échéant. Pour des descriptions des paramètres, consultez le document : *Système d'aide*.
5. (Facultatif) Cliquez sur **Add Experiment**.

**Conseil !** Pour modifier ou supprimer l'expérience, utilisez la liste en regard du champ **Experiment**.

6. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Cliquez sur **Save > Lock Method** pour enregistrer et verrouiller la méthode MS.

- Cliquez sur **Save > Save**.
- Cliquez sur **Save > Save as**.

## Créer une méthode MRM HR avec Guided MRM HR

Utilisez l'option **Guided** si un contrôle supérieur des tensions de démarrage et d'arrêt est requis.

1. Ouvrez l'espace de travail MS Method.
2. Cliquez sur **New > Guided MRM HR**.  
La page Preparation s'ouvre.
3. Sélectionnez le mode :
  - **Guided** : pour plus de contrôle sur les tensions de début et de fin.
  - **Automatic** : pour autoriser le logiciel à sélectionner automatiquement les valeurs de tension de début et de fin.
4. Sélectionnez une **Polarity**.
5. Procédez de la manière suivante pour utiliser des transitions connues :
  - a. Cliquez sur **Use known transitions**.
  - b. Saisissez le **Compound ID**, **Precursor Ion (Da)** et **Fragment to Use (Da)**.
6. Procédez de la manière suivante pour utiliser des transitions inconnues :
  - a. Cliquez sur **Find transitions automatically**.
  - b. Spécifiez **Compound Name**, **Charge**, **Precursor Ion** et **Number of Fragments to Use** dans le tableau pour chaque composé.
7. Cliquez sur **Continue**.  
La page Initial Conditions apparaît.
8. Si nécessaire, modifiez les **Source and Gas Parameters**.
9. Si le traitement ne se fait pas automatiquement, cliquez sur **Start**.
10. Sur la page Optimize DP, cliquez sur **Ramp**.  
Le logiciel augmente automatiquement le paramètre DP et trouve la valeur DP la plus intense pour chaque transition.
11. (Mode automatique) Attendez que le DP optimal et le CE optimal aient été identifiés pour chacun des ions produits et que la page Review Report apparaisse. Passez ensuite à l'étape [13](#)
12. Sur la page Optimize DP, cliquez sur **Ramp**.  
Le logiciel augmente automatiquement le paramètre DP et trouve la valeur DP la plus intense pour chaque transition.
13. (En option) Enregistrez le rapport en suivant ces étapes :
  - a. Sur la page Report, cliquez sur **Save report as**.

- b. Accédez au dossier souhaité pour enregistrer le rapport, saisissez un **File name**, puis cliquez sur **Save**.
- 14. Cliquez sur **Continue** pour ouvrir la méthode optimisée dans l'espace de travail MS Method.
- 15. Saisissez la durée de méthode requise dans le champ **Method Duration**.
- 16. Réalisez l'une des opérations suivantes pour enregistrer la méthode MS :
  - Cliquez sur **Save > Save** pour enregistrer la méthode dans le même projet, avec le même nom.
  - Cliquez sur **Save > Save As** pour enregistrer la méthode avec un nouveau nom ou dans un autre projet.
  - Cliquez sur **Save > Lock Method** pour verrouiller la méthode si elle est prête pour une analyse de routine.

---

**Remarque :** Verrouillez la méthode pour empêcher les utilisateurs non autorisés de l'éditer. Seuls les utilisateurs avec la permission **Lock/Unlock methods** peuvent éditer les méthodes verrouillées. Les autres utilisateurs peuvent uniquement les soumettre.

---

La boîte de dialogue Save As MS Method s'ouvre.

- 17. Saisissez un nom dans le champ **File Name**.
- 18. Cliquez sur **Save**.

## Expériences de méthodes MS

Utilisez l'espace de travail MS Method pour créer ou modifier des méthodes MS. Une méthode MS peut contenir une ou plusieurs expériences. Par défaut, une nouvelle méthode TOF MS contient une seule expérience.

Les types d'expérience MS disponibles sont les suivants :

- Trois expériences pour des méthodes de base : TOF MS, TOF MSMS et Q1
- Trois expériences pour des méthodes combinées : IDA, SWATH et MRM<sup>HR</sup>

En outre, une procédure pas à pas est disponible et permet d'accompagner l'utilisateur lors de la création d'une expérience MRM<sup>HR</sup>. Une fois la procédure terminée, les paramètres sont utilisés pour renseigner la méthode MRM<sup>HR</sup>.

**Tableau 5-2 : Expérience d'une méthode de base**

Type	Définition
TOF MS	Analyse de masse à l'aide de la région TOF. Les valeurs <i>m/z</i> des ions sont retenues en fonction de leur temps de vol dans la région TOF.
TOF MSMS	L'ion précurseur est sélectionné à l'aide du filtre de masse quadripolaire. Les valeurs <i>m/z</i> des ions fragments sont renvoyées en fonction de leur temps de vol dans les régions TOF MS. Cette expérience est utilisée pour déterminer la structure des composés.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

Tableau 5-2 : Expérience d'une méthode de base (suite)

Type	Définition
Q1	Acquisition de données utilisant le filtre de masse quadripolaire. L'intensité d'ionisation est renvoyée pour les masses dans la plage du balayage.

Tableau 5-3 : Expériences d'une méthode combinée

Type	Définition
IDA	Une expérience IDA (de l'anglais « Information Dependent Acquisition », ou acquisition dépendante de l'information) analyse les données lors de leur acquisition et modifie les conditions de l'expérience selon les résultats de l'analyse. L'analyse des résultats détermine les masses sur lesquelles effectuer des balayages dépendants. L'utilisateur a un contrôle absolu sur les critères qui activent une expérience IDA et sur les paramètres de l'expérience IDA qui sont activés.
SWATH	L'acquisition SWATH permet l'analyse MS/MS de tous les ions précurseurs sur une plage de masses étendue sur une échelle de temps LC. Le quadripôle Q1 est défini sur une largeur de fenêtre de sélection plus importante (en général, de 10 Da à 50 Da) que celle utilisée pour les acquisitions classiques d'ion produit. En avançant pas à pas dans les différentes fenêtres séquentielles de sélection, l'utilisateur peut couvrir rapidement une plage de masses étendue. Les spectres de masse résultants constituent un composite des fragments de tous les ions précurseurs passés par la fenêtre de sélection Q1. Cette technique permet une analyse MS/MS non ciblée de toutes les espèces dans un échantillon.
MRM HR	L'expérience MRM <sup>HR</sup> permet d'acquérir des données MS/MS de haute qualité à partir de composés dont les masses et les temps de rétention sont connus. Cette acquisition peut également être utilisée pour extraire des masses de fragments avec des largeurs étroites (0,02 Da) des spectres TOF MSMS. L'extraction étroite permet d'obtenir une sélectivité nettement meilleure.
MRM HR guidée	Procédure pas à pas permettant d'accompagner l'utilisateur lors de la création d'une méthode MRM <sup>HR</sup> . Une fois les étapes de la procédure terminées, les paramètres sont utilisés pour renseigner le type de la méthode MRM <sup>HR</sup> .

## À propos des méthodes MS

Une méthode MS est constituée des éléments suivants :

- Paramètres qui appartiennent à l'intégralité de la méthode, notamment les paramètres **Source and Gas**.
- Une ou plusieurs expériences.



## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

- Chaque méthode doit comporter au moins une expérience.
- Toute méthode peut contenir plus d'une expérience. Ce type d'expérience est désigné par le terme suivant : « expériences en boucle ».
- Les expériences TOF MS et TOF MSMS peuvent être mises en boucle au sein d'une méthode (10 expériences maximum). Les expériences Q1 ne peuvent pas être mises en boucle.
- Les expériences IDA, SWATH et MRM<sup>HR</sup> peuvent être mises en boucle au sein d'une méthode (2 expériences maximum).

**Remarque :** Seules des combinaisons spécifiques d'expériences peuvent être utilisées, par exemple IDA + IDA, IDA + MRM<sup>HR</sup>, IDA + SWATH et SWATH + MRM<sup>HR</sup>.

- Chaque expérience est dotée de paramètres avancés spécifiques.
- Balayages individuels au sein de chaque expérience.

**Tableau 5-4 : Fonctionnalités de l'espace de travail MS Methods**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Créer une méthode avec plus d'une expérience, c'est-à-dire, des expériences en boucle.	Cliquez sur <b>Add Experiment</b> , puis sur un type d'expérience.
Modifier l'expérience au sein d'une méthode MS existante.	Cliquez sur la liste en regard de l'option <b>Experiment</b> , puis sur un type d'expérience.
Convertir une expérience TOF MSMS en une expérience IDA..	Cliquez sur la liste en regard de l'option <b>Experiment</b> , puis sur <b>Add IDA criteria</b> .
Lors d'une expérience MRM <sup>HR</sup> , supprimer l'expérience TOF MS de la méthode.	Cliquez sur la liste en regard de l'option <b>Experiment</b> , puis sur <b>Delete TOF MS (of MRM HR)</b> . <hr/> <b>Remarque :</b> Application aux expériences en boucle uniquement. <hr/>
Supprimer une expérience lorsqu'il existe plusieurs expériences au sein d'une méthode.	Cliquez sur la liste en regard de l'option <b>Experiment</b> , puis sur <b>Delete experiment</b> .

Tableau 5-4 : Fonctionnalités de l'espace de travail MS Methods (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
<p>Pour afficher les structures de méthode suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Le nombre d'expériences au sein d'une méthode.</li><li>• La durée de planification de chaque expérience au sein d'une méthode.</li><li>• Le nombre de balayages TOF MSMS pour plusieurs expériences.</li></ul>	<p>Développez ou réduisez le volet <b>Method Overview</b> sur le côté gauche de l'espace de travail.</p>

## Calculer l'énergie de collision dynamique pour les méthodes MS

1. Ouvrez l'espace de travail MS Method.
2. Créez ou ouvrez une méthode MS qui contient des critères IDA ou des critères d'application SWATH.
3. Cliquez sur **Options > Dynamic collision energy**.
4. Modifiez les informations dans les champs, comme requis.
5. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour utiliser les valeurs par défaut enregistrées précédemment afin de calculer l'énergie de collision dynamique, cliquez sur **Load Default Settings**.
  - Pour enregistrer les valeurs actuelles en tant que valeurs par défaut à utiliser pour calculer l'énergie de collision dynamique dans les nouvelles méthodes, cliquez sur **Save as Default Settings**.
  - Pour appliquer les valeurs actuelles à la méthode actuelle afin de calculer l'énergie de collision dynamique, cliquez sur **Apply**.
  - Pour fermer la boîte de dialogue et abandonner les modifications, cliquez sur **Cancel**.

## Ouvrir une méthode MS

Utilisez cette procédure pour ouvrir une méthode MS créée avec SCIEX OS.

1. Ouvrez l'espace de travail MS Method.
2. Cliquez sur **Open**.  
La boîte de dialogue Open MS Method apparaît. Elle contient la liste des méthodes MS dans le projet actuel.
3. (Facultatif) Si la méthode à ouvrir ne se trouve pas dans le projet actuel, sélectionnez le projet contenant la méthode à ouvrir.

4. Sélectionnez la méthode MS à ouvrir, puis cliquez sur **Open**.

---

**Conseil !** Pour sélectionner plusieurs méthodes, utilisez la clé **Shift** ou **Ctrl**.

---

## Exécuter une méthode MS manuellement

### Procédures préalables

- Dans l'espace de travail MS Method, créez une méthode MS ou ouvrez une méthode existante. Consulter la section : [Espace de travail MS Method](#) ou [Ouvrir une méthode MS](#).

Utilisez cette procédure pour exécuter la méthode active dans l'espace de travail MS Method.

1. Cliquez sur la flèche vers le bas sur le bouton **Start** dans le volet Data Acquisition, puis cliquez sur l'une des options suivantes :
  - **Start**: Cette option exécute la méthode MS sans LC.
  - **Start with LC**

Consulter la section : [Volet Data Acquisition](#)



---

**AVERTISSEMENT !** Risque d'incendie. Ne pas envoyer plus de 3 ml/min de solvant vers la source d'ions. Bien que les composants LC puissent assurer un débit pouvant atteindre 5 ml/min, un débit de plus de 3 ml/min de solvant peut provoquer une accumulation de solvant dans la source d'ions. Il est possible de diviser le flux à l'aide d'un T pour s'assurer que le débit maximal fourni dans la source d'ions ne dépasse pas 3 ml/min.

---

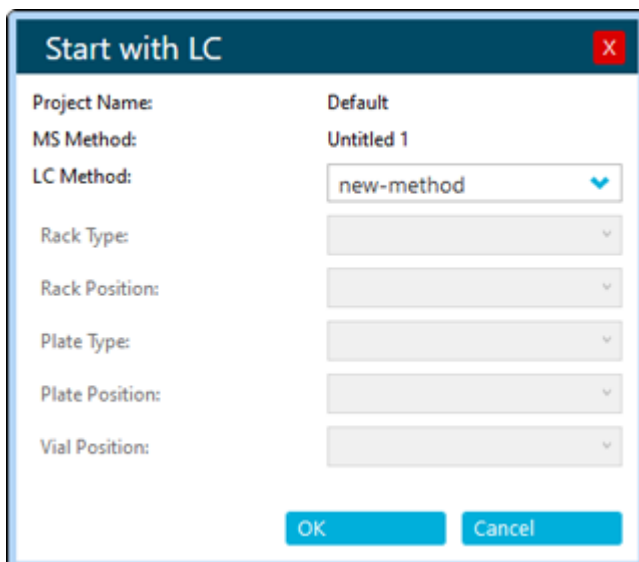
Si l'utilisateur clique sur **Start with LC**, la boîte de dialogue Start with LC s'ouvre alors. Pour des informations sur les champs dans cette boîte de dialogue, consultez le document : *Système d'aide*.

---

**Remarque :** Le système LC doit être activé et une méthode LC doit avoir été créée et enregistrée.

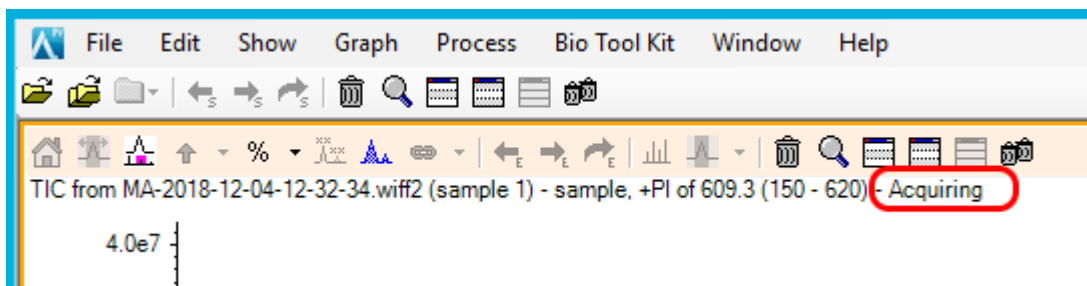
---

Illustration 5-1 : Boîte de dialogue Start with LC



- (Facultatif) Pour consulter les données dans l'espace de travail Explorer, cliquez sur **Open data exploration to view real-time data** (🔍) dans le volet Data Acquisition. L'acquisition en temps réel est indiquée dans le volet Explore par les mots **Acquiring**, **Finished** ou **Aborted** dans le titre de l'échantillon.

Illustration 5-2 : Acquisition en temps réel - Acquisition en cours



- (Facultatif) Optimisez les paramètres MS, selon les besoins. Pour une description des paramètres, consultez le document : *Système d'aide*.
- Cliquez sur **Stop** dans le volet Data Acquisition.
- (Facultatif) Pour enregistrer les données, respectez les étapes suivantes :
  - Cliquez sur **Save** pour enregistrer les données. La boîte de dialogue Save Data s'ouvre.
  - (Facultatif) Sélectionnez le projet et le sous-dossier, le cas échéant, où les données seront enregistrées.
  - Saisissez un nom dans le champ **File Name**.
  - Cliquez sur **Save**.
- Réalisez l'une des opérations suivantes pour enregistrer la méthode MS :

- Cliquez sur **Save > Save** pour enregistrer la méthode dans le même projet, avec le même nom.
- Cliquez sur **Save > Save As** pour enregistrer la méthode avec un nouveau nom ou dans un autre projet.
- Cliquez sur **Save > Lock Method** pour verrouiller la méthode si elle est prête pour une analyse de routine.

---

**Remarque :** Verrouillez la méthode pour empêcher les utilisateurs non autorisés de l'éditer. Seuls les utilisateurs avec la permission **Lock/Unlock methods** peuvent éditer les méthodes verrouillées. Les autres utilisateurs peuvent uniquement les soumettre.

---

La boîte de dialogue Save As MS Method s'ouvre.

7. Saisissez un nom dans le champ **File Name**.
8. Cliquez sur **Save**.

## Espace de travail LC Method

Utilisez cet espace de travail pour créer et gérer des méthodes LC.

Plusieurs méthodes peuvent être ouvertes dans l'espace de travail LC Method. Le menu **Views** permet de transformer la disposition des fenêtres de méthodes en vues à onglets, flottantes ou avec une mosaïque verticale ou horizontale. Dans la vue flottante, les fenêtres peuvent être redimensionnées, agrandies, réduites, sorties de la fenêtre SCIEX OS ou affichées sur un autre écran.

La barre de titre de la fenêtre de méthode contient les noms des méthodes et des projets. Dans les vues en mosaïque et flottantes, la barre de titre de la méthode active est bleue et les barres de titres des autres méthodes sont grises. Dans la vue à onglets, l'onglet pour la méthode active est blanc et les onglets pour les autres méthodes sont bleus.

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

## Créer une méthode LC

Consultez la documentation fournie avec l'appareil LC.

1. Ouvrez l'espace de travail LC Method.
2. Cliquez sur **New**.
3. Cliquez sur un appareil dans le volet de gauche, puis modifiez les champs selon les besoins.
4. Enregistrez et verrouillez, si vous le souhaitez, la méthode LC en cliquant sur l'une des commandes suivantes :
  - **Save** : pour enregistrer la méthode LC.
  - **Save > Lock Method** : pour enregistrer et verrouiller la méthode LC.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

La boîte de dialogue Save As LC Method s'ouvre.

5. Dans le champ **File Name**, entrez un nom pour la méthode LC, puis cliquez sur **Save**.

## Espace de travail Batch

L'espace de travail Batch contient des informations sur un ensemble d'échantillons à acquérir et éventuellement à traiter. Les lots indiquent au logiciel l'ordre dans lequel acquérir et traiter les échantillons.

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

---

**Remarque** : Pour l'auto-échantillonneur sélectionné, le type de carrousel, la position du carrousel, le type de plaque, la position de la plaque et la position du flacon dépendent tous les uns des autres et seules certaines valeurs sont valides.

---

**Tableau 5-5 : Colonnes de l'espace de travail Batch**


Nom de la colonne	Définition	Exigences de valeur de champ
<b>Sample and method information</b> (Informations sur les échantillons et les méthodes) 		
<b>Sample Name</b>	(Nom de l'échantillon) Nom de l'échantillon.	Inférieur à 252 caractères.
<b>Sample ID</b>	(ID de l'échantillon) Nombre personnalisé ou autre identifiant pour l'échantillon.	Inférieur à 252 caractères. Le champ <b>Sample ID</b> ne peut pas contenir un des caractères non valides suivants : \ / ; * ? " < >   =
<b>Barcode ID</b>	(ID de code-barres) ID unique d'un échantillon.	Inférieur à 250 caractères.
<b>MS Method</b>	(Méthode MS) Nom de la méthode.	La méthode MS doit exister dans le projet en cours. Le champ n'est pas sensible à la case.
<b>LC Method</b>	(Méthode LC) Nom de la méthode de chromatographie liquide.	La méthode LC doit exister dans le projet en cours. Le champ n'est pas sensible à la case.
<b>Rack Type</b>	(Type de carrousel) Le type de carrousel pour l'auto-échantillonneur.	Doit être l'un des choix valides pour l'auto-échantillonneur spécifié dans la méthode LC.
<b>Rack Position</b>	(Position du carrousel) Position du carrousel sur le plateau.	Valeur numérique.

Tableau 5-5 : Colonnes de l'espace de travail Batch (suite)

Nom de la colonne	Définition	Exigences de valeur de champ
<b>Plate Type</b>	<p>(Type de plaque) Le type de plaque de puits dans l'auto-échantillonneur.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Cette colonne n'est pas disponible si le <b>Rack Type</b> décrit des flacons.</p>	Doit être l'un des choix valides pour l'auto-échantillonneur spécifié dans la méthode LC.
<b>Plate Position</b>	(Position de la plaque) Position de la plaque sur le plateau.	Doit correspondre à l'une des positions de plaque prédéfinies de l'auto-échantillonneur.
<b>Vial Position</b>	(Position du flacon) (Méthodes LC) La position du flacon dans un carrousel ou sur une plaque.	Valeur numérique. La valeur la plus haute ne doit pas dépasser le nombre de flacons dans le carrousel.
<b>Injection Volume (µL)</b>	<p>(Volume d'injection (µL)) Quantité d'échantillon à injecter.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b></p> <p>Pour les méthodes LC uniquement, le volume d'injection est issu de la méthode LC. L'utilisateur peut remplacer ce volume d'injection dans l'espace de travail Batch ou dans le fichier de lot importé. Lorsque le lot est soumis, le volume d'injection est validé par rapport à la plage prise en charge par l'appareil LC.</p> <p>Pour revenir au volume d'injection spécifié dans la méthode LC, supprimez le contenu de ce champ, puis sélectionnez de nouveau la méthode LC dans le champ <b>LC Method</b>.</p>	Valeur numérique.

Tableau 5-5 : Colonnes de l'espace de travail Batch (suite)


Nom de la colonne	Définition	Exigences de valeur de champ
<b>Sample Type</b>	(Type d'échantillon) Le type d'échantillon.	Assurez-vous que le type d'échantillon correspond à l'un des types d'échantillon prédéfinis. Tout type qui ne correspond pas est automatiquement remplacé par Unknown.
<b>Dilution Factor</b>	(Facteur de dilution) Le facteur de dilution pour les différents échantillons.	Pour les méthodes développées par SCIEX, la valeur doit être de 1,000000.  Doit être une valeur supérieure à zéro avec six décimales. La valeur par défaut est 1,000000. Ne laissez pas le champ vide.
<b>Data File</b>	(Fichier de données) Nom du fichier dans lequel sont enregistrées les données acquises. Inclure le chemin d'accès complet au sous-dossier dans lequel le fichier sera conservé.	Doit contenir moins de 252 caractères. Le nombre total de caractères comprend le nombre de caractères dans le chemin du sous-dossier de données. Le fichier de données ne peut pas contenir un des caractères non valides suivants : \ / : ; * ? " < >   =  <b>Conseil !</b> Cliquez sur la flèche pour sélectionner un sous-dossier dans la liste ou saisissez le nom d'un sous-dossier. Veillez à inclure une barre oblique inversée (\) et le nom du sous-dossier et le nom de fichier. Si le sous-dossier n'existe pas, il sera créé lors de l'exécution du lot.



Tableau 5-5 : Colonnes de l'espace de travail Batch (suite)

Nom de la colonne	Définition	Exigences de valeur de champ
<b>Processing Method</b>	<p>(Méthode de traitement) Nom de la méthode. Si un <b>Results File</b> existant doit être utilisé, laissez ce champ vide. Lorsqu'un <b>Results File</b> existant est sélectionné, la valeur <b>*Embedded Method*</b> apparaît automatiquement dans ce champ.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> La méthode de traitement doit être compatible avec la méthode MS spécifiée pour l'échantillon.</p>	<p>Sélectionnez une méthode de traitement dans la liste de méthodes de traitement dans le projet.</p>
<b>Results File</b>	<p>(Fichier de résultats) Nom du fichier dans lequel sont enregistrés les résultats traités. Si un <b>Results File</b> valide est spécifié, les données des échantillons seront traitées automatiquement une fois l'acquisition terminée. Si le nom de fichier n'est pas valide, il est impossible de terminer le processus de soumission de lot.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Si un <b>Results File</b> existant est sélectionné, la méthode intégrée pour le fichier de résultats sélectionné est utilisée pour le traitement, et le texte dans la cellule <b>Processing Method</b> est remplacé par <b>*Embedded Method*</b>.</p>	<p>Le nom de fichier ne peut pas contenir un des caractères non valides suivants : \ / ; * ? " &lt; &gt;   =</p> <p>Le chemin d'accès au fichier, y compris le nom de fichier et les sous-dossiers, doit comporter moins de 252 caractères.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Cliquez sur la flèche pour sélectionner un fichier de résultats existant dans la liste. Pour créer un fichier, saisissez le nom du fichier. Le fichier sera créé lors du traitement du premier échantillon dans le lot soumis.</p>
<b>Comment</b>	(Commentaire) Texte	<p>Doit contenir moins de 50 caractères. Le champ <b>Comment</b> ne peut pas contenir un des caractères non valides suivants : \ / ; * ? " &lt; &gt;   =</p>

Tableau 5-5 : Colonnes de l'espace de travail Batch (suite)

Nom de la colonne	Définition	Exigences de valeur de champ
<b>Custom columns</b>	(Colonnes personnalisées) (Facultatif) Colonnes définies par l'utilisateur, au format texte, entier ou nombre réel.	Les exigences dépendent du format.
<b>Component Concentrations</b> (Concentrations des composants) (  )		
<b>Component</b>	(Nom du composant) Le nom d'un composant défini dans la méthode MS, la méthode de traitement ou le tableau de résultats.  Le lot peut contenir jusqu'à 4 000 lignes de composants.	Les noms des composants sont issus de la méthode MS, pour les balayages MRM, la méthode de traitement ou le tableau de résultats. Le nom est validé au cours de la création de la méthode.  Il est également possible d'ajouter des composants au tableau manuellement. Consulter la section : <a href="#">Ajouter une concentration du composant</a> .  <b>Remarque</b> : Si le fichier d'importation contient une colonne de données qui ne correspond à aucune des colonnes de la grille de lot, elle est traitée comme une colonne de composé ou de nom de composant. Une colonne de concentration est ajoutée et remplie avec les valeurs de cette colonne de données.
<b>Component concentration</b>	Concentration en analytes ou en standards internes pour les types d'échantillons standard et CQ. Le tableau contient une colonne pour chaque échantillon. Le nom de l'échantillon est utilisé comme nom de la colonne.	Valeur numérique supérieure ou égale à zéro.

## Gérer le lot

**Remarque** : veillez à sélectionner le nom de projet correct dans le panneau d'état.

Dans l'espace de travail Batch, utilisez les fonctions suivantes pour gérer le lot.

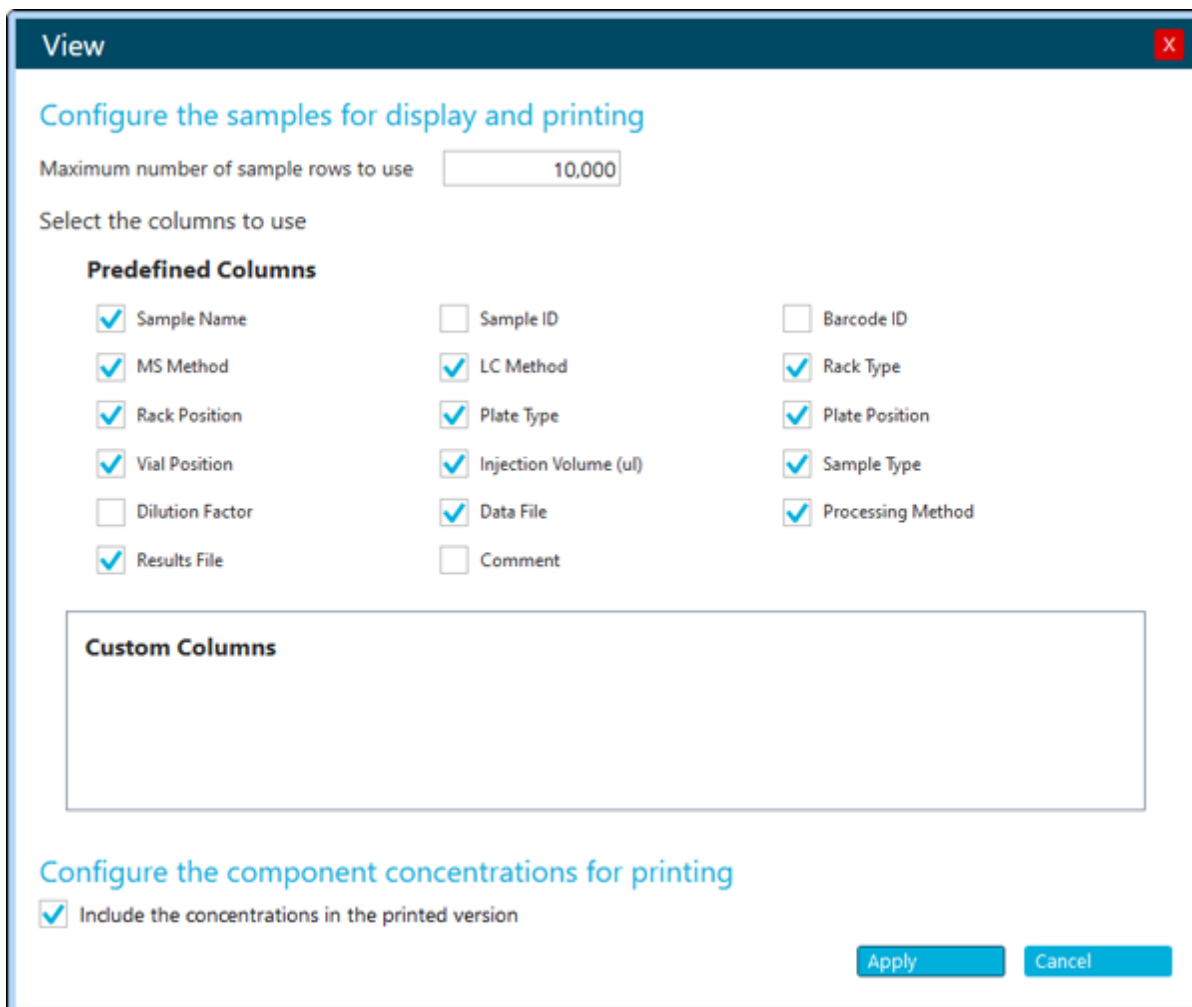
**Tableau 5-6 : Fonctionnalités de l'espace de travail Batch**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Afficher ou masquer des colonnes	Cliquez sur <b>View</b> . Consulter la section : <a href="#">Afficher ou masquer des colonnes</a>
Couper des lignes	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Cut</b> .
Copier des lignes	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Copy</b> .
Coller des lignes	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Paste</b> .
Insérer une ligne	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Insert sample</b> .
Supprimer une ligne	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Delete sample</b> .
Sélectionner des colonnes	Cliquez sur <b>View</b> . Consulter la section : <a href="#">Afficher ou masquer des colonnes</a>
Ajouter un sous-dossier à un projet	Cliquez sur <b>Manage Samples &gt; Add data sub-folders</b> . Consultez le document : <i>Système d'aide</i> .
Imprimer le lot	Cliquez sur <b>Print</b> .
Enregistrer le lot dans le projet actuel	Cliquez sur <b>Save &gt; Save</b> ou sur <b>Save &gt; Save As</b> .
Exporter le lot au format txt ou csv	Cliquez sur <b>Save &gt; Export</b> .

### Afficher ou masquer des colonnes

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Cliquez sur **View**.
3. Cochez ou décochez les cases de la colonne, au besoin, dans la boîte de dialogue Affichage. Pour des descriptions des colonnes, consultez le tableau : [Tableau 5-5](#).

Illustration 5-3 : Boîte de dialogue View



4. Cliquez sur **OK**.

## Ajouter une colonne personnalisée

Utilisez cette procédure pour ajouter des colonnes au lot afin de stocker des informations supplémentaires sur l'échantillon, telles que le poids sec, afin de pouvoir les utiliser pour le traitement, par exemple dans les formules et les colonnes calculées.

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Cliquez avec le bouton droit dans la grille de lot, puis cliquez sur **Add Custom Column**. La boîte de dialogue Add Custom Column apparaît.
3. Dans le champ **Column name**, saisissez un nom pour la colonne.  
Ce nom doit être unique. Il ne peut pas être identique au nom d'une autre colonne prédéfinie.
4. Dans le champ **Column type**, sélectionnez l'un des types suivants :

- **Integer** : la colonne contient des nombres entiers. Les valeurs décimales seront arrondies au nombre entier le plus proche.
  - **Real** : la colonne contient des nombres réels, avec jusqu'à six chiffres après la virgule.
  - **Text** : la colonne contient du texte, jusqu'à 128 caractères.
5. Cliquez sur **Add**.  
La nouvelle colonne est ajoutée à droite de l'espace de travail Batch.

### Modifier le nom d'une colonne personnalisée

---

**Remarque** : Le **Column type** ne peut pas être modifié.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Cliquez avec le bouton droit dans la colonne à modifier, puis cliquez sur **Edit Custom Column**.  
La boîte de dialogue Edit Custom Column apparaît.
3. Dans le champ **Name**, saisissez le nouveau nom pour la colonne.  
Ce nom doit être unique. Il ne peut pas être identique au nom d'une autre colonne prédéfinie.
4. Cliquez sur **Apply**.

### Supprimer des colonnes personnalisées

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Cliquez avec le bouton droit dans la grille de lot, puis cliquez sur **Delete Custom Column**.  
La boîte de dialogue Delete Custom Column apparaît.
3. Cochez la case à côté des noms des colonnes à supprimer.
4. Cliquez sur **Delete**.

## Importer un lot depuis un fichier

### Procédures préalables

- Créez un fichier de lot. Pour une description des champs à inclure dans le fichier, consultez le tableau : [Tableau 5-5](#).

**Remarque :** Dans le fichier Microsoft Excel qui est importé, les colonnes prédéfinies doivent arriver en premier, suivies par les colonnes personnalisées. Les en-têtes de colonnes pour les colonnes prédéfinies doivent correspondre aux noms de colonnes dans SCIEX OS. Si les en-têtes des colonnes prédéfinies ne sont pas corrects, les informations ne sont pas importées. Seul le point est pris en charge comme séparateur décimal dans les fichiers csv ou xsl.

**Remarque :** Fermez le fichier de lot avant de l'importer. Il est impossible d'importer le fichier de lot s'il est ouvert dans Microsoft Excel.

- (Facultatif pour une importation depuis un LIMS Watson) Pour renseigner automatiquement le champ **LC Method**, veillez à ce que le nom de la méthode LC soit identique au nom de la méthode MS.

**Remarque :** Le LIMS Watson n'a pas de champ de méthode LC. Si le nom de la méthode LC est différent du nom de la méthode MS, la colonne de la méthode LC doit être renseignée manuellement.

Passez en revue les contenus du lot avant d'envoyer les échantillons.

**Conseil !** Pour accéder aux fonctions couper, copier, coller, ajouter des lignes et supprimer des lignes, cliquez sur **Manage Samples**.

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. (Facultatif) Cliquez sur **View** pour sélectionner les colonnes qui apparaîtront dans l'espace de travail Batch.
3. Cliquez sur **Open > Import from file**.  
La boîte de dialogue Batch Import s'ouvre.
4. Cliquez sur **Browse**.
5. Naviguez jusqu'au fichier requis.
6. Cliquez sur **Open**.
7. (En option) Cochez ou décochez la case **Append to current batch**, le cas échéant.

**Remarque :** Les éventuelles données présentes dans la grille sont écrasées si l'utilisateur ne sélectionne pas l'option **Append to current batch**.

8. Cliquez sur **Import**.

9. (Facultatif) Pour utiliser la disposition des plaques en tant que référence pour sélectionner ou confirmer l'emplacement d'un échantillon, cliquez sur **Plate Layout**.  
La disposition des plaques fournit automatiquement les positions des puits et des flacons pour les échantillons non assignés.
10. Assurez-vous que la température du four à colonne est atteinte avant d'envoyer le lot.
11. Enregistrez le lot:
  - a. Cliquez sur **Save As**.  
La boîte de dialogue Save As Batch s'ouvre.
  - b. Saisissez un **File Name** puis cliquez sur **Save**.
12. Envoyez le lot. Consulter la section : [Envoyer un lot](#)

## Importer un lot depuis un LIMS

Procédures préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• Configurez le LIMS dans l'espace de travail Configuration. Consultez le document : <i>Système d'aide</i>.</li></ul>



---

**Remarque** : Pour importer un lot depuis un LIMS Watson, consultez la section : [Importer un lot depuis un fichier](#).

---

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. (Facultatif) Cliquez sur **View** pour sélectionner les colonnes qui apparaîtront dans l'espace de travail Batch.
3. Cliquez sur **Open > Import from LIMS**.  
La boîte de dialogue Import a Batch File s'ouvre.
4. Saisissez l'emplacement ou le nom du fichier.
5. Saisissez l'identificateur du lot dans le champ **Batch Identifier**.
6. (En option) Cochez ou décochez la case **Append to current batch**, le cas échéant.

---

**Remarque** : Les éventuelles données présentes dans la grille sont écrasées si l'utilisateur ne sélectionne pas l'option **Append to current batch**.

---

7. Cliquez sur **Import**.
8. (Facultatif) Pour utiliser la disposition des plaques en tant que référence pour sélectionner ou confirmer l'emplacement d'un échantillon, cliquez sur **Plate Layout**.  
La disposition des plaques fournit automatiquement les positions des puits et des flacons pour les échantillons non assignés.
9. (En option) Pour inclure des échantillons d'étalonnage dans le lot, procédez ainsi :
  - a. Pour ouvrir la boîte de dialogue Batch-Automatic Calibration Editor, cliquez sur **Auto-Calibrate**.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

- b. Sélectionnez les paramètres de référence d'ions et de distribution de solution d'étalonnage à appliquer automatiquement à la fréquence spécifiée.
  - c. Cliquez sur **OK**.
  - d. Cochez la case à gauche du bouton **Auto-Calibrate**.
10. Assurez-vous que la température du four à colonne est atteinte avant d'envoyer le lot.
11. Enregistrez le lot:
- a. Cliquez sur **Save As**.  
La boîte de dialogue Save As Batch s'ouvre.
  - b. Saisissez un **File Name** puis cliquez sur **Save**.
12. Envoyez le lot. Consulter la section : [Envoyer un lot](#)

## Créer un lot manuellement

Passez en revue les contenus du lot avant d'envoyer les échantillons.

---

**Remarque :** Si le spectromètre de masse utilise la fermeture de contact pour communiquer avec un périphérique externe, suivez les consignes ci-après :

- Vérifiez que la séquence d'échantillonnage définie dans le lot correspond à la séquence définie sur le périphérique externe.
- Assurez-vous que la durée de la méthode est inférieure ou égale à l'intervalle de temps entre les injections défini sur le périphérique externe.

---

**Conseil !** Pour accéder aux fonctions couper, copier, coller, ajouter des lignes et supprimer des lignes, cliquez sur **Manage Samples**.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. (Facultatif) Cliquez sur **View** pour sélectionner les colonnes qui apparaîtront dans l'espace de travail Batch.

---

**Conseil !** Pour utiliser un lot existant, cliquez sur **Open > Open**.

---

3. Cliquez sur **New**.
4. (Facultatif) Pour utiliser la disposition des plaques en tant que référence pour sélectionner ou confirmer l'emplacement d'un échantillon, cliquez sur **Plate Layout**.  
La disposition des plaques fournit automatiquement les positions des puits et des flacons pour les échantillons non assignés.
5. Saisissez les informations relatives au lot dans le tableau.  
Vous trouverez une description des colonnes dans la grille dans le tableau : [Tableau 5-5](#).



**Conseil !** L'espace de travail Batch propose les fonctions suivantes pour faciliter la création de lots :

- Le contenu de certaines cellules, par exemple **Sample Type**, peut être sélectionné à partir d'une liste dans la cellule. Cliquez sur le côté droit de la cellule pour afficher la liste.
- La deuxième ligne ajoutée à un lot et les suivantes sont automatiquement remplies avec les valeurs de la ligne précédente.
- L'utilisateur peut copier une cellule unique en la sélectionnant, en cliquant dans l'angle inférieur droit de la cellule, puis en faisant glisser vers la dernière ligne dans laquelle le contenu de la cellule doit être copié.
- L'utilisateur peut copier un groupe de cellules sur la même ligne en les sélectionnant, en cliquant dans l'angle inférieur de la cellule la plus à droite, puis en faisant glisser vers la dernière ligne dans laquelle le contenu de la cellule doit être copié.
- L'utilisateur peut copier une série de valeurs en saisissant des valeurs consécutives sur deux lignes, en sélectionnant les deux cellules, en cliquant dans l'angle inférieur droit de la cellule du bas, puis en faisant glisser vers la dernière ligne de la série.
- L'utilisateur peut utiliser les commandes Copy (**Ctrl+C**) et Paste (**Ctrl+V**) pour copier le contenu d'une cellule ou d'un groupe de cellules et les coller à un nouvel emplacement.

---

**Remarque :** Les colonnes LC ne sont pas disponibles tant que la méthode LC n'est pas sélectionnée.

---

**Conseil !** Pour configurer le lot pour le traitement automatique de l'échantillon après son acquisition, utilisez l'une des méthodes suivantes :

- Pour utiliser une méthode de traitement intégrée, sélectionnez un **Results File** existant. L'échantillon sera traité avec la méthode intégrée du fichier de résultats correspondant.
- Pour utiliser une nouvelle méthode de traitement, effacez le contenu du champ **Results File**. Lorsque le champ **Results File** est effacé, le champ **Processing Method** devient disponible. Sélectionnez une **Processing Method**, puis saisissez un nouveau nom de **Results File**. L'échantillon sera traité avec la méthode de traitement sélectionnée.

Lors du traitement dans le flux de travail de sélection non ciblé, il est impossible de sélectionner un échantillon de comparaison pour le traitement automatique. Pour les méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme AutoPeak, le logiciel crée toujours le modèle d'intégration avec les échantillons utilisés pour créer la méthode.

- 
6. (Facultatif) Définissez les concentrations des composants. Voir la section : [Ajouter une concentration du composant](#)
  7. (Facultatif) Respectez les étapes suivantes pour appliquer des règles de décision au lot :

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

- a. Cochez la case **Decision Rules**.
- b. Cliquez sur **Decision Rules** puis sélectionnez **Apply** pour chaque règle de décision à appliquée au lot. Pour ajouter des règles de décision, reportez-vous à la section : [Ajouter une règle de décision](#).
- c. Cliquez sur **Save**.

---

**Remarque :** Si l'option **Decision Rules** est sélectionnée et si au moins une règle de décision est active pour un lot, l'option **Decision Rules: Active** apparaît à côté du nom du lot dans l'espace de travail Queue. Si le projet actif se trouve sur le réseau et si le réseau est indisponible, le texte **Decision Rules: Disabled** est affiché.

---

8. Enregistrez le lot:
  - a. Cliquez sur **Save As**.  
La boîte de dialogue Save As Batch s'ouvre.
  - b. Saisissez un **File Name** puis cliquez sur **Save**.
9. Assurez-vous que la température du four à colonne est atteinte avant d'envoyer le lot.
10. Veillez à ce que le système ait été équilibré avec la méthode MS et LC utilisée dans le lot.
11. Envoyez le lot. Consulter la section : [Envoyer un lot](#)

## Utiliser la fonction Plate Layout pour créer un lot

La fonction Plate Layout fournit une représentation graphique des structures de carousel et de plaque qui peuvent être utilisées pour remplir la grille dans l'espace de travail Batch.

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Sélectionnez un **MS Method**.
3. Sélectionnez un **LC Method**.  
Le système LC doit être actif.
4. Saisissez le nom du **Data File** où les données acquises ont été sauvegardées.
5. Sélectionnez la **Processing Method** qui sera utilisée pour traiter les données après leur acquisition.
6. Saisissez le nom du **Results File** où les données traitées ont été sauvegardées.
7. Cliquez sur **Plate Layout**.  
La fenêtre Plate Layout s'ouvre et, par défaut, montre une représentation graphique de la plaque.
8. Définissez les propriétés pour la plaque.  
La fenêtre est mise à jour et affiche une représentation graphique du type de plaque sélectionné.
9. Sur la représentation graphique, cliquez sur une position d'échantillon.  
La position d'échantillon sélectionnée est entièrement mise en surbrillance dans la représentation graphique. L'espace de travail Batch est mis à jour en commençant par la première ligne où la position d'échantillon n'est pas complètement définie, c'est-à-dire

une ligne qui ne comprend pas les valeurs **Rack Type**, **Plate Type**, en cas d'utilisation des puits, et **Vial Position**. La grille montre les positions d'échantillons en conséquence.

10. Continuez à cliquer sur des positions d'échantillons au besoin dans la représentation graphique pour remplir la grille de l'espace de travail Batch.  
Si les positions d'échantillons sont saisies dans la grille de l'espace de travail Batch, la représentation graphique est alors mise à jour en conséquence.

---

**Conseil !** Pour supprimer toutes les données associées à un type de carrousel spécifié, cliquez sur **Clear All**. Si le type de carrousel sélectionné identifie une plaque, le menu sous l'option **Clear All** inclut alors les options **Clear Front** et **Clear Back**.

---

11. Pour spécifier une position d'échantillon sélectionnée de réplicat, cliquez sur la position de l'échantillon dans la représentation graphique.  
La représentation graphique de la disposition des plaques montre la position d'échantillon de réplicat avec un contour en couleur et la grille dans l'espace de travail Batch montre les données en conséquence.

### Illustration 5-4 : Disposition des plaques—Position d'échantillon de réplicat (Position 1)



---

**Remarque :** les positions non sélectionnées sont représentées en gris, et les positions qui ont été sélectionnées une fois apparaissent en bleu avec un contour gris.

---

12. Pour voir l'index d'échantillon dans la représentation graphique, placez le curseur de la souris au-dessus de la position d'échantillon en surbrillance.  
Une info-bulle affiche l'index d'échantillon.
13. Lorsque toutes les positions sont attribuées et contrôlées, cliquez sur **Close** dans la fenêtre Plate Layout, puis cliquez sur **Save** dans l'espace de travail Batch.

## Créer un tableau de référence d'ions

1. Ouvrez l'espace de travail Batch.
2. Cliquez sur **Auto-Calibrate**.  
La boîte de dialogue Batch - Automatic Calibration Editor s'ouvre.
3. Cliquez sur **Edit**.  
La boîte de dialogue Ion Reference Table Editor s'ouvre.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

4. Cliquez sur **New**.

---

**Conseil !** Pour vous déplacer d'une cellule à une autre, utilisez la touche de tabulation. Appuyez sur Enter pour ajouter une ligne.

---

5. Dans la grille **Reference Ions for TOF MS Calibration**, saisissez la masse d'un ion précurseur.  
Le champ **Compound Name** est facultatif.
6. Ajoutez autant de lignes que nécessaire.
7. Dans la colonne **Use**, sélectionnez les ions à utiliser.
8. Sélectionnez le bouton radio **Use for MS/MS** pour la masse de l'ion précurseur à utiliser pour MS/MS.
9. Saisissez les valeurs dans les champs **CE for MS/MS** et **DP for MS/MS** pour la masse de l'ion précurseur sélectionnée à l'étape 8.
10. Dans la grille **Reference Ions for MS/MS Calibration**, ajoutez, puis sélectionnez au moins deux masses de fragments.  
Le champ **Fragment Name** est facultatif.
11. Cliquez sur **OK**.
12. Saisissez un nom dans la boîte de dialogue Save Reference Table, puis cliquez sur **OK**.

---

**Remarque :** Si les utilisateurs sélectionnent une méthode LC en tant que méthode de distribution de solution d'étalonnage, l'heure de rétention et la tolérance d'heure de rétention doivent être spécifiées dans le tableau de référence des ions.

---

## Étalonner le système à l'aide du CDS

---

**Remarque :** Si le spectromètre de masse est configuré avec l'option de fermeture de contact, reportez-vous à la section : [Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact](#).

---

1. Ouvrez l'espace de travail **Batch**.
2. Cliquez sur **Auto-Calibrate**.  
La boîte de dialogue Batch - Automatic Calibration Editor s'ouvre.
3. Sélectionnez un tableau de référence des ions.

---

**Remarque :** Pour les méthodes TOF MSMS, vérifiez que la masse du précurseur sélectionnée dans le tableau de référence est supérieure à la masse du précurseur la plus basse dans la méthode.

---

4. Saisissez le nombre d'échantillons à acquérir entre les étalonnages.
  5. Sélectionnez **CDS** en tant que méthode de distribution de solution d'étalonnage.  
Le canal CDS 1 est sélectionné par défaut. Utilisez le canal 1 pour les solutions positives et le canal 2 pour les solutions négatives.
  6. Cliquez sur **OK** pour fermer la boîte de dialogue.
-

7. Assurez-vous que la case à gauche du bouton **Auto-Calibrate** est cochée.
8. Créez et soumettez un lot.

## Étalonner le système selon une méthode LC

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec l'option de fermeture de contact, reportez-vous à la section : [Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact](#).

---

1. Ouvrez l'espace de travail **Batch**.
2. Cliquez sur **Auto-Calibrate**.  
La boîte de dialogue Batch - Automatic Calibration Editor s'ouvre.
3. Sélectionnez un tableau de référence des ions.
4. Saisissez le nombre d'échantillons à acquérir entre les étalonnages.
5. Sélectionnez une méthode LC en tant que méthode de distribution de solution d'étalonnage.  
Les champs de carrousel, de plaque et de flacon de l'échantillonneur automatique ainsi que le champ de méthode MS se trouvent sur le côté droit de la boîte de dialogue.
6. Sélectionnez une méthode MS, puis les informations concernant le carrousel, la plaque et le flacon.
7. Cliquez sur **OK** pour fermer la boîte de dialogue.
8. Assurez-vous que la case à gauche du bouton **Auto-Calibrate** est cochée.
9. Créez et soumettez un lot.

## Gérer les concentrations des composants


### Ajouter une concentration du composant

Le lot contient les concentrations de composant définies dans la méthode MS, la méthode de traitement ou le tableau de résultats. Utilisez cette procédure pour ajouter des concentrations de composants.

---


**Remarque** : Les concentrations de composants ajoutées en suivant cette procédure peuvent être modifiées pour les échantillons de type contrôle qualité et standard. Les concentrations de composants sont également ajoutées à un lot lorsqu'une méthode de traitement contenant des composants est définie pour un échantillon. Les concentrations de composants ajoutées par cette méthode de traitement ne peuvent être modifiées que pour les échantillons avec les méthodes de traitement contenant le composant.

---

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Component Concentrations** ()
  2. Cliquez sur **Manage Components > Add Component**.
  3. Saisissez le nom du **Component**.
  4. Cliquez sur **OK**.  
La nouvelle concentration de composant est ajoutée au lot actuel.
-

### Supprimer une concentration du composant

Utilisez cette procédure pour supprimer une concentration de composant du lot.

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Component Concentrations** .
2. Cliquez sur **Manage Components > Remove Component**.  
Une liste des composants s'affiche. Il contient tous les composants ajoutés avec la commande **Add Component Concentration** ou lorsqu'une méthode MRM ou de traitement a été ajoutée au lot.
3. Sélectionnez le composant dans la liste.
4. Cliquez sur **OK**.

### Gérer les règles de décision

#### Ajouter une règle de décision

Utilisez cette procédure pour ajouter une règle de décision.

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur **Add Rule**.  
La boîte de dialogue Decision Rule Configuration apparaît.
3. Saisissez un nom pour la règle de décision.
4. Définissez les paramètres de la règle de décision, y compris la règle de signalisation, si la règle de signalisation doit être évaluée, et la réponse. Consultez le document : *Système d'aide*.
5. Cliquez sur **Save** pour sauvegarder la règle de décision.
6. Cliquez sur **Save** pour fermer la boîte de dialogue.

---

**Remarque :** Si l'utilisateur ne clique pas sur **Save** dans la boîte de dialogue Decision Rules, la nouvelle règle de décision n'est pas sauvegardée.

---

#### Modifier une règle de décision

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur **Decision Rule Name** pour la règle de décision à modifier.  
La boîte de dialogue Decision Rule Configuration apparaît.
3. Modifiez le **Decision rule name** et les paramètres de la règle de décision, y compris la règle de signalisation, si la règle de signalisation doit être évaluée, et la réponse. Consultez le document : *Système d'aide*.
4. Cliquez sur **Save** pour sauvegarder la règle de décision.
5. Cliquez sur **Save** pour fermer la boîte de dialogue.

**Remarque** : Si l'utilisateur ne clique pas sur **Save** dans la boîte de dialogue Decision Rules, la nouvelle règle de décision n'est pas sauvegardée.

---

### Supprimer une règle de décision

Utilisez cette procédure pour supprimer une règle de décision.

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur le lien **Flagging Rule Used**.
3. Cliquez sur **Delete Rule** pour supprimer la règle de décision.
4. Cliquez sur **Save**.

### Créer une règle dupliquée

Utilisez cette procédure pour créer une règle dupliquée.

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur la règle de décision à dupliquer.
3. Cliquez sur **Duplicate Rule**.
4. Cliquez sur **Save**.

### Importer des règles de décision

Utilisez cette procédure pour importer des règles de décision.

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur **Import List**.
3. Accédez au fichier texte à importer et sélectionnez-le, puis cliquez sur **Open**.
4. Cliquez sur **Save**.

### Exporter des règles de décision

1. Dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Decision Rules**.  
La boîte de dialogue Decision Rules apparaît.
2. Cliquez sur **Export List**.
3. Accédez au dossier souhaité où le fichier texte sera sauvegardé, saisissez un nom de fichier, puis cliquez sur **Save**.
4. Cliquez sur **Cancel**.

## Équilibrer le système

Équilibrez le système en début de journée, avant l'exécution d'une nouvelle méthode ou avant de soumettre un lot. L'équilibrage chauffe et prépare le spectromètre de masse et le système LC pour l'échantillon ou le lot suivant.

1. Cliquez sur **Equilibrate** dans le panneau d'état.  
La boîte de dialogue Equilibrate s'ouvre.
2. Sélectionnez une méthode MS dans la liste **MS Method**.
3. Sélectionnez une méthode LC dans la liste **LC Method**.
4. Indiquez le temps d'équilibrage en minutes dans le champ **Time (min)**.
5. Cliquez sur **OK**.  
Une fois l'équilibrage terminé, l'état du système dans le volet d'état est Ready.

---

**Conseil !** Ouvrez l'espace de travail Queue pour suivre l'évolution de l'équilibrage. L'espace de travail Queue indique le temps nécessaire à l'équilibrage. Pour arrêter l'équilibrage avant la fin, cliquez sur **Stop** dans l'espace de travail Queue.

---

## Envoyer un lot

Procédures préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Équilibrer le système</a>.</li><li>• Ouvrez un lot dans l'espace de travail Batch.</li></ul>



1. Cliquez sur **Submit**.  
La boîte de dialogue Submit Samples apparaît.
2. Cliquez sur **OK** pour continuer.

---

**Remarque :** Si l'option **Auto-Calibrate** est sélectionnée et que le spectromètre de masse est configuré avec l'option de fermeture de contact, alors la première acquisition de l'étalonnage est effectuée automatiquement. Ensuite, le système passe à l'état Loading jusqu'à ce que l'utilisateur commence une injection sur le périphérique externe.

---

Si des erreurs apparaissent en haut de l'écran, résolvez-les, puis cliquez à nouveau sur **Submit**. Le lot n'est ajouté à la file d'attente qu'une fois que toutes les erreurs ont été résolues.

---

**Conseil !** Si la file d'attente n'est pas démarrée, naviguez alors vers l'espace de travail Queue, puis cliquez sur **Start** dans la barre de menus.

---



## Soumettre un échantillon unique à la file d'attente depuis l'espace de travail Batch

### Procédures préalables

- [Équilibrer le système.](#)
- Ouvrez un lot dans l'espace de travail Batch.

1. Sélectionnez le numéro d'index de la ligne de l'échantillon.
2. Cliquez sur **Submit**.  
La boîte de dialogue Submit Samples apparaît.
3. Cliquez sur **OK** pour continuer.

---

**Remarque :** Si l'option **Auto-Calibrate** est sélectionnée et que le spectromètre de masse est configuré avec l'option de fermeture de contact, alors la première acquisition de l'étalonnage est effectuée automatiquement. Ensuite, le système passe à l'état Loading jusqu'à ce que l'utilisateur commence une injection sur le périphérique externe.

---

Si des erreurs apparaissent en haut de l'écran, résolvez-les, puis cliquez à nouveau sur **Submit**. Le lot n'est ajouté à la file d'attente qu'une fois que toutes les erreurs ont été résolues.

---

**Conseil !** Si la file d'attente n'est pas démarrée, naviguez alors vers l'espace de travail Queue, puis cliquez sur **Start** dans la barre de menus.

---

## Soumettre plusieurs échantillons à la file d'attente depuis l'espace de travail Batch

### Procédures préalables

- [Équilibrer le système.](#)
- Ouvrez un lot dans l'espace de travail Batch.

1. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Appuyez sur **Ctrl** tout en cliquant sur le numéro d'index de la ligne d'échantillon de chaque échantillon.
  - Faites glisser la liste des numéros d'index vers le haut ou vers le bas.

---

**Remarque :** Les échantillons sont soumis dans leur ordre de sélection, et non dans leur ordre de présentation au lot.

---

2. Cliquez sur **Submit**.  
La boîte de dialogue Submit Samples apparaît.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

3. Cliquez sur **OK** pour continuer.

**Remarque** : Si l'option **Auto-Calibrate** est sélectionnée et que le spectromètre de masse est configuré avec l'option de fermeture de contact, alors la première acquisition de l'étalonnage est effectuée automatiquement. Ensuite, le système passe à l'état Loading jusqu'à ce que l'utilisateur commence une injection sur le périphérique externe.

---

Si des erreurs apparaissent en haut de l'écran, résolvez-les, puis cliquez à nouveau sur **Submit**. Le lot n'est ajouté à la file d'attente qu'une fois que toutes les erreurs ont été résolues.

---

**Conseil !** Si la file d'attente n'est pas démarrée, naviguez alors vers l'espace de travail Queue, puis cliquez sur **Start** dans la barre de menus.

---

## Espace de travail Queue

L'espace de travail Queue affiche :

- Statut de la file d'attente
- Statut du lot
- État d'acquisition et de traitement des échantillons

Dans cet espace de travail, l'utilisateur peut gérer les lots et échantillons dans la file d'attente.

Par défaut, les échantillons n'apparaissent pas dans la file d'attente. Les informations sur l'échantillon sont réduites sous le nom du lot. L'état du lot, le nom du lot, le nombre d'échantillons dans le lot et le temps restant pour acquérir le lot actuel sont affichés. L'échantillon d'étalonnage inclus dans le lot est affiché en tant que Cal dans la file d'attente de la colonne Sample Name.

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

**Remarque** : Ne modifiez pas manuellement la position de la vanne de dérivation intégrée pendant l'acquisition de l'échantillon.

---

### Illustration 5-5 : Espace de travail Queue

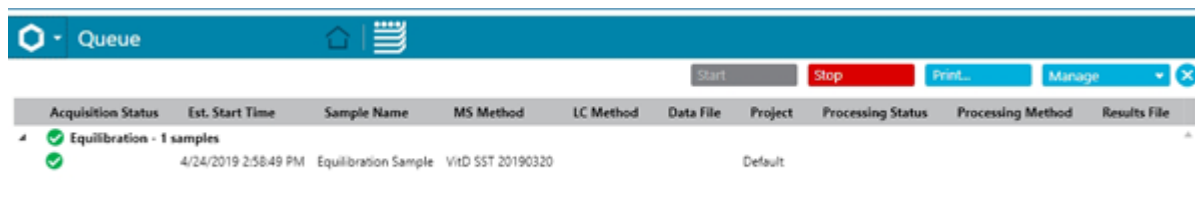


Tableau 5-7 : Colonnes de l'espace de travail Queue

Libellé	Description
<i>Nom du lot</i>	<p>Le nom du lot qui a été soumis à la file d'attente, le nombre d'échantillons dans le lot et l'état de traitement de la règle de décision.</p> <p>La file d'attente contient une ligne pour chaque lot. Par défaut, le lot est réduit, mais il peut être développé pour afficher tous les échantillons dans le lot. Pour chaque échantillon, des informations apparaissent dans les colonnes suivantes.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Pour les lots avec traitement des règles de décision, le logiciel retarde l'acquisition de l'échantillon suivant afin de permettre de terminer le traitement de l'échantillon actuel. Si le traitement ne se termine pas dans les délais autorisés, les règles de décision sont désactivées. Le délai est de 1,5 fois le temps d'acquisition.</p>
<b>Acquisition Status</b>	(État d'acquisition) L'état d'acquisition des données. Pour plus d'informations sur les icônes d'état, consultez la section : <a href="#">Icônes de la file d'attente</a> .
<b>Est. Start Time</b>	(Heure de début estimée) L'heure à laquelle cette acquisition de l'échantillon a débuté.
<b>Acquisition Time</b>	(Heure d'acquisition) Durée qui a été nécessaire à l'acquisition de cet échantillon.
<b>Sample Name</b>	(Nom de l'échantillon) Le nom de l'échantillon, comme indiqué dans le lot.
<b>Sample ID</b>	(ID de l'échantillon) L'identifiant de l'échantillon, comme indiqué dans le lot.
<b>Barcode</b>	(Code-barres) Le numéro de code-barres du flacon d'échantillon, comme indiqué dans le lot.
<b>Rack Code</b>	(Code de carrousel) L'identifiant du carrousel LC, comme indiqué dans le lot.
<b>Rack Position</b>	(Position du carrousel) L'emplacement d'installation du carrousel LC, comme indiqué dans le lot.
<b>Plate Code</b>	(Code de plaque) L'identifiant de la plaque LC, comme indiqué dans le lot.
<b>Plate Position</b>	(Position de la plaque) L'emplacement d'installation de la plaque LC, comme indiqué dans le lot.
<b>Vial Position</b>	(Position du flacon) L'emplacement de l'échantillon dans le carrousel ou la plaque LC.
<b>MS Method</b>	(Méthode MS) La méthode MS spécifiée dans le lot.
<b>LC Method</b>	(Méthode LC) La méthode LC spécifiée dans le lot.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

Tableau 5-7 : Colonnes de l'espace de travail Queue (suite)

Libellé	Description
<b>Injection Volume</b>	(Volume d'injection) Quantité d'échantillon injectée.
<b>Data File</b>	(Fichier de données) Nom du fichier de données dans lequel seront acquises.
<b>Scanned Barcode</b>	(Code-barres lu) L'identifiant du flacon.
<b>User</b>	(Utilisateur) Le nom de l'utilisateur qui a soumis le lot.
<b>Project</b>	(Projet) Le projet dans lequel le fichier de données sera enregistré.
<b>Data File Status</b>	(État du fichier de données) L'état du fichier de données.
<b>Auto Processing Status</b>	(État de traitement automatique) L'état du traitement des données. Pour plus d'informations sur les icônes d'état, consultez la section : <a href="#">Icônes de la file d'attente</a> .
<b>Processing Method</b>	(Méthode de traitement) La méthode de traitement qui sera utilisée pour traiter les données acquises. Si un fichier de résultats existant est utilisé, cette colonne contient le texte <i><b>Embedded Method</b></i> .
<b>Results File</b>	(Fichier de résultats) Le fichier dans lequel les données traitées seront écrites.
<b>Decision Rule Status</b>	(État de la règle de décision) L'état de signalisation d'un échantillon et l'action réalisée par la règle de décision.
<b>Decision Rule Summary</b>	(Récapitulatif de la règle de décision) Le nom de la règle de décision qui est déclenchée.

## Gérer la file d'attente

L'acquisition débute une fois que les échantillons ont été envoyés à partir de l'espace de travail Batch. Assurez-vous que le système est équilibré avant d'envoyer un lot. Consulter la section : [Équilibrer le système](#)

---

**Remarque** : Analyser à nouveau l'échantillon en cas d'interruption anormale pendant l'acquisition de l'échantillon. Si l'interruption anormale est due à une panne d'alimentation, la température du plateau de l'auto-échantillonneur n'est pas maintenue et l'intégrité des échantillons peut être compromise.



---

Utilisez les fonctions du tableau suivant pour gérer les échantillons et les lots de la file d'attente.

Tableau 5-8 : Fonctions de l'espace de travail Queue




Pour faire ceci	Procédez comme suit
Afficher ou masquer les colonnes.	Cliquez sur <b>Manage &gt; Display Columns</b> . Consulter la section : <a href="#">Afficher ou masquer des colonnes</a>

Tableau 5-8 : Fonctions de l'espace de travail Queue (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Afficher tous les échantillons dans le lot.	Cliquez sur  .
Réduire tous les échantillons du lot.	Cliquez sur  .
Démarrer l'acquisition.	Cliquez sur <b>Start</b> . Équilibrez le système avant d'analyser des échantillons.
Afficher le statut des échantillons envoyés.	Double-cliquez sur l'en-tête du lot.
Procéder à une nouvelle acquisition des échantillons sélectionnés.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur les échantillons.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Reacquire samples</b>.</li> </ol>
Supprimer les échantillons sélectionnés.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur les échantillons.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Delete samples</b>.</li> </ol>
Supprimer tous les échantillons situés sous l'échantillon sélectionné.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur l'échantillon.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Delete samples below row selection</b>.</li> </ol>
Effacer la file d'attente de tous les lots ou échantillons acquis.	Cliquez sur <b>Manage &gt; Clear queue</b> .
Retirer la mise en valeur d'une ligne sélectionnée.	Cliquez sur <b>Manage &gt; Clear all selections</b> .
Déplacer le lot ou l'échantillon sélectionné vers le haut de la file d'attente.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur l'en-tête du lot.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Move row to top</b>.</li> </ol> <hr/> <p><b>Remarque</b> : Seuls les lots ou les échantillons individuels n'ayant pas été acquis peuvent être déplacés.</p> <hr/>
Déplacer l'échantillon sélectionné vers le haut dans la file d'attente.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur l'échantillon.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Move row up</b>.</li> </ol> <hr/> <p><b>Remarque</b> : Seuls les échantillons individuels n'ayant pas été acquis peuvent être déplacés.</p> <hr/>

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

**Tableau 5-8 : Fonctions de l'espace de travail Queue (suite)**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Déplacer l'échantillon sélectionné vers le bas dans la file d'attente.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur l'échantillon.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Manage &gt; Move row down</b>.</li> </ol> <hr/> <p><b>Remarque</b> : Seuls les échantillons individuels n'ayant pas été acquis peuvent être déplacés.</p>
Réduire tous les échantillons et les lots.	Cliquez sur <b>Manage &gt; Collapse all rows</b> .
Afficher tous les échantillons et les lots.	Cliquez sur <b>Manage &gt; Expand all rows</b> .
Afficher les données d'un échantillon en cours d'acquisition.	<p>Effectuez l'une des opérations suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Double-cliquez sur l'échantillon en cours d'acquisition.</li> </ul> <hr/> <p><b>Remarque</b> : double-cliquez sur l'une des colonnes à gauche de la colonne <b>Processing Status</b>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Cliquez sur <b>Open data exploration to view real time data</b> () dans le volet Data Acquisition.</li> </ul>
Afficher les données d'un échantillon qui a été acquis.	Double-cliquez sur la coche verte (  ) de la colonne <b>Acquisition Status</b> .
Afficher le fichier de résultats qui a été créé.	Double-cliquez sur la coche verte (  ) de la colonne <b>Processing Status</b> .
Vérifier que les flacons à code-barres sont lus.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur <b>Manage &gt; Display Columns</b>.</li> <li>2. Cochez la case <b>Barcode</b> ou <b>Scanned Barcode</b>, ou les deux, dans la boîte de dialogue Select Columns. Consulter la section : <a href="#">Afficher ou masquer des colonnes</a></li> <li>3. Cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol>
Arrêter la file d'attente.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur <b>Stop</b>.</li> <li>2. Sélectionnez <b>Stop now</b> ou <b>Stop after the current tasks are completed</b>.</li> <li>3. Cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol>
Arrêter le traitement de tous les échantillons mis en file d'attente restants.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur <b>Cancel remaining processing</b>.</li> <li>2. Cliquez sur <b>Yes</b>.</li> </ol>

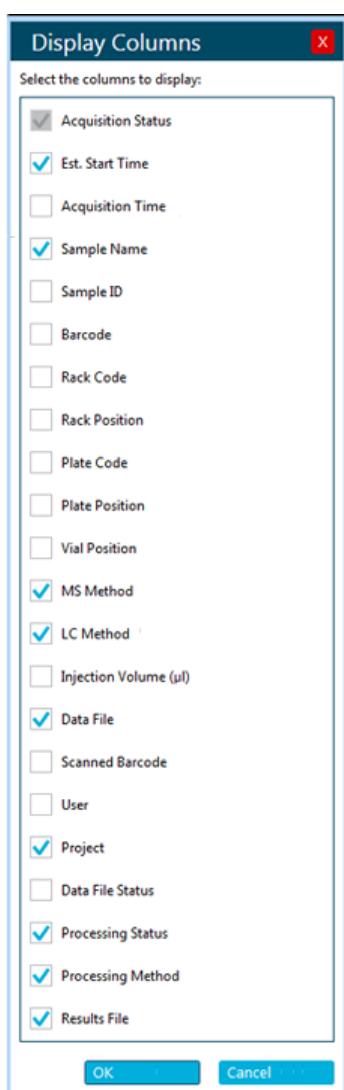
**Tableau 5-8 : Fonctions de l'espace de travail Queue (suite)**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Imprimer la file d'attente.	Cliquez sur <b>Print</b> dans le menu de l'espace de travail.

## Afficher ou masquer des colonnes

1. Dans l'espace de travail Queue, cliquez sur **Manage > Display Columns**.
2. Cochez ou décochez les cases de la colonne, au besoin, dans la boîte de dialogue Display Columns. Pour une description des colonnes, consultez le tableau : [Tableau 5-7](#).

**Illustration 5-6 : Boîte de dialogue Display Columns**



3. Cliquez sur **OK**.

## Icônes de la file d'attente

Tableau 5-9 : Icônes de la file d'attente










Icône	Nom	Description
	Flèche Développer	Affiche les échantillons du lot.
	Flèche Réduire	Masque les échantillons du lot.

Tableau 5-10 : Icônes d'état de l'acquisition

Icône <sup>1</sup>	Nom	Description
	<b>Completed</b>	L'échantillon ou le lot complet a bien été acquis. Double-cliquez sur cette icône pour ouvrir l'échantillon dans l'espace de travail Explorer.
	<b>Warning</b>	L'échantillon a été acquis, mais l'utilisateur a arrêté ou prolongé l'acquisition.
	<b>Failed</b>	L'échantillon ou un échantillon du lot n'a pas été acquis avec succès.
	<b>Failed</b>	L'échantillon d'étalonnage ne répond pas aux critères d'acceptation. Pour afficher le rapport d'état, double-cliquez sur l'icône.
	<b>In Progress</b>	L'échantillon ou le lot est en cours d'acquisition.
	<b>Waiting</b>	L'échantillon ou le lot n'a pas encore été acquis ou n'est pas en cours d'acquisition.
	<b>Barcode Warning</b>	Une erreur de lecture de code-barres s'est produite ou une incohérence a été observée entre le code-barres et l'échantillon.

<sup>1</sup> Si des règles de décision sont utilisées, l'état d'acquisition peut être affecté par la règle de décision. Par exemple, il est possible que la règle de décision abandonne un échantillon ou arrête la file d'attente. La règle de décision tient compte de tous les échantillons dans le lot et, si les échantillons sont traités dans des fichiers de résultats différents, de leurs fichiers de résultats associés. Même les échantillons qui ne sont plus visibles dans la file d'attente sont pris en compte.



Tableau 5-11 : Icônes d'état de traitement






Icône <sup>2</sup>	Nom	Description
	<b>Completed</b>	L'échantillon a bien été traité. Double-cliquez sur cette icône pour ouvrir le fichier de résultats dans l'espace de travail Analytics.
	<b>Warning</b>	Le traitement a été arrêté par l'utilisateur.
	<b>Failed</b>	L'échantillon n'a pas été traité avec succès.
	<b>In Progress</b>	L'échantillon est en cours de traitement.
	<b>Waiting</b>	L'échantillon n'a pas encore été traité.

Tableau 5-12 : Icônes d'état des règles de décision







Icône <sup>3 4</sup>	Nom	Description
	<b>Flagging rule passed</b>	L'échantillon remplit les critères de succès pour la règle de signalisation configurée dans la règle de décision.
	<b>Flagging rule marginal</b>	L'échantillon remplit les critères marginaux pour la règle de signalisation configurée dans la règle de décision.
	<b>Flagging rule failed</b>	L'échantillon remplit les critères d'échec pour la règle de signalisation configurée dans la règle de décision.
	<b>Queue stopped</b>	La file d'attente est arrêtée en fonction d'une règle de décision. Cette icône apparaît également lorsque la file d'attente est arrêtée et que le lot suivant est acquis.
	<b>Sample injected</b>	L'échantillon est réinjecté en fonction d'une règle de décision ou l'échantillon est injecté depuis un flacon configuré dans la règle de décision.

Tableau 5-13 : Icônes d'état du fichier de données



Icône	Nom	Description
	<b>Transfer Complete</b>	L'échantillon a été transféré vers le projet en réseau.

<sup>2</sup> Si la colonne **Processing Status** est vide, aucune méthode de traitement et aucun fichier de résultats n'a été sélectionné pour l'échantillon.

<sup>3</sup> Les icônes d'état de signalisation et leurs infobulles apparaissent lorsque l'utilisateur fait passer la souris au-dessus du nom de la règle de décision, du nom de la règle de signalisation et de l'action réalisée.

<sup>4</sup> Si l'utilisateur choisit d'évaluer la règle après l'acquisition de tous les standards, les états des échantillons signalés sont mis à jour de manière rétroactive.

Tableau 5-13 : Icônes d'état du fichier de données (suite)

Icône	Nom	Description
	<b>Transfer in Process</b>	L'échantillon est en cours de transfert vers le projet en réseau.
	<b>Transfer Failed</b>	Le transfert de l'échantillon a échoué. SCIEX OS réessaiera de transférer l'échantillon.

## Espace de travail MS Tune

Un fichier .dat est créé par le logiciel lorsque les données de l'instrument sont enregistrées. Ce fichier permet de restaurer les états antérieurs des paramètres. Le fichier de sauvegarde .dat est nommé à l'aide de l'heure de création du fichier, et non à l'aide de l'heure à laquelle il a été enregistré.

---

**Remarque** : Quand la sonde APCI est utilisée, seules les fonctions Quick Status Check et Advanced Troubleshooting sont disponibles. Pour effectuer d'autres procédures d'ajustement, installez la sonde ESI.

---

Chaque fois que l'utilisateur charge la procédure MS Tune, tous les paramètres du spectromètre de masse sont sauvegardés.

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

## Effectuer un contrôle rapide de l'état

Procédures préalables
-----------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Vérifiez que la bonne sonde est installée</li></ul> |
|---|

Utilisez cette procédure pour étalonner le système et vérifier rapidement la résolution en modes TOF MS et MS/MS. Si la précision de masse de l'alignement des canaux ne répond pas aux caractéristiques, l'utilisateur peut alors recommencer les étapes et étalonner le système. Si la résolution ne répond pas aux caractéristiques, l'utilisateur peut alors effectuer une procédure d'ajustement TOF afin d'optimiser le système.

---

**Conseil !** Les utilisateurs peuvent évaluer cette procédure en cliquant sur **MS Check** sur le panneau d'état.

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec un CDS, le logiciel démarre automatiquement ce dernier au début de l'étape Achieve Stable Spray. Le logiciel arrête le CDS lorsque l'utilisateur ferme l'espace de travail MS Tune.

---

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.

2. Sélectionnez **Positive Quick Status Check** ou **Negative Quick Status Check** dans la liste **Tuning Procedures**.
3. Cliquez sur **Next**.
4. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
5. (Facultatif) Consultez le rapport pour vérifier les résultats de chaque étape.
6. (En option) Enregistrez le rapport.
7. Cliquez sur **Save Tuning Settings** si les résultats sont satisfaisants. Si les résultats ne sont pas satisfaisants, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Répétez les étapes.
  - Réalisez la procédure d'ajustement TOF MS. Consulter la section : [Régler TOF](#)
  - Annulez les résultats en fermant l'espace de travail **MS Tune**.
  - Restaurez les paramètres précédents en sélectionnant le fichier de sauvegarde approprié dans le menu **Restore Instrument Data**.

## Optimiser le détecteur

Lorsque la sensibilité du système est faible, utilisez cette procédure pour vérifier que la tension du détecteur est optimisée. Au cours de la procédure, le logiciel peut régler la tension du détecteur afin de fournir la sensibilité optimale. Lorsque l'optimisation est terminée, l'utilisateur peut enregistrer la valeur optimisée ou abandonner les modifications.

---

**Remarque** : Veillez à réaliser cette procédure en modes de masse élevée et de masse faible.

---

Nous vous recommandons d'optimiser le détecteur une fois par mois. Le détecteur doit également être optimisé en cas de baisse significative de la sensibilité et après ventilation et nettoyage de l'instrument.

---

**Remarque** : Le vieillissement du détecteur est fonction de l'exposition aux ions, ainsi une optimisation plus fréquente peut être nécessaire en cas d'utilisation d'échantillons très concentrés.

---

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec un CDS, le logiciel démarre automatiquement ce dernier au début de l'étape Achieve Stable Spray. Le logiciel arrête le CDS lorsque l'utilisateur ferme l'espace de travail MS Tune.

---

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Depuis la liste **Tuning Procedures**, réalisez l'une des opérations suivantes :
  - (Systèmes ZenoTOF) Sélectionnez **Positive Detector Optimization** ou **Negative Detector Optimization**.
  - (Systèmes X500 QTOF) Sélectionnez **Detector Optimization**.

## Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

---

La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif du processus d'optimisation, toute condition préalable et les instructions.

3. Veillez à ce que la pompe à seringue soit configurée correctement. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du système*. Cliquez ensuite sur **Next**.
4. Assurez-vous que la pulvérisation est stable, puis cliquez sur **Next**.
5. Suivez les instructions qui apparaissent à l'écran. Consultez le document : *Système d'aide*.  
Le rapport d'optimisation s'affiche.
6. (En option) Enregistrez le rapport en suivant ces étapes :
  - a. Sur la page Report, cliquez sur **Save report as**.
  - b. Accédez au dossier souhaité pour enregistrer le rapport, saisissez un **File name**, puis cliquez sur **Save**.
7. Cliquez sur **Next**.
8. Cliquez sur **Save Settings**.

---

**Remarque** : Si le détecteur est optimisé à 2 650 V ou plus, contactez alors l'assistance [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support) afin de remplacer le détecteur.

---

Le message suivant apparaît : « Les paramètres de réglage ont été enregistrés ».

## Régler l'option Q1 Unit

Dans les expériences MS/MS, la zone Q1 est utilisée pour sélectionner un ion précurseur pour la fragmentation. Le réglage de l'unité Q1 optimise la largeur de pic et étalonne la masse Q1. L'unité Q1 représente la largeur de la fenêtre de sélection de l'ion précurseur à la résolution de l'unité. L'option Q1 Low ou Open représente la largeur de la fenêtre de sélection de l'ion précurseur à une résolution basse (fenêtre plus large) ou à une résolution ouverte (fenêtre ouverte). Une fois l'unité Q1 réglée, les paramètres Q1 Low et Open sont calculés en fonction des valeurs de l'unité Q1.

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec un CDS, le logiciel démarre automatiquement ce dernier au début de l'étape Achieve Stable Spray. Le logiciel arrête le CDS lorsque l'utilisateur ferme l'espace de travail MS Tune.

---

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **Positive Q1 Unit Tuning** ou **Negative Q1 Unit Tuning** dans la liste **Tuning Procedures**.
3. Cliquez sur **Next**.
4. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
5. (Facultatif) Cliquez sur **Edit Method** pour modifier les paramètres.
6. Si un étalonnage a été effectué, cliquez sur **Confirm** afin de réaliser une acquisition de confirmation.

7. Cliquez sur **Next**.
8. (En option) Enregistrez le rapport.
9. Cliquez sur **Next**.
10. Cliquez sur **Save Settings**.

### Régler TOF

La procédure de réglage TOF MS optimise les paramètres de résolution et de sensibilité dans les modes TOF MS et MS/MS. L'optimisation commence avec une vérification des performances du système avant le réglage. Différents paramètres sont ensuite incrémentés pour une intensité et une résolution maximales. Après l'alignement des canaux, le système est étalonné et les performances du système sont déterminées. Si les performances s'avèrent satisfaisantes, l'utilisateur peut alors enregistrer les paramètres de réglage ou les rejeter.

Le réglage TOF MS peut être effectué en mode automatique ou manuel. En mode manuel, les utilisateurs peuvent sélectionner les valeurs de paramètre optimisées ou faire une pause une fois les étapes de réglage complétées.

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec un CDS, le logiciel démarre automatiquement ce dernier au début de l'étape Achieve Stable Spray. Le logiciel arrête le CDS lorsque l'utilisateur ferme l'espace de travail MS Tune.

---

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Depuis la liste **Tuning Procedures**, réalisez l'une des opérations suivantes :
  - (Systèmes X500 QTOF) Sélectionnez **Positive TOF MS Tuning** ou **Negative TOF MS Tuning**.
  - (Systèmes ZenoTOF) Sélectionnez **Positive TOF Tuning** ou **Negative TOF Tuning**.
3. Assurez-vous que la pulvérisation est stable.
4. Cliquez sur **Next**.
5. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
6. Cliquez sur **Next**.
7. (En option) Enregistrez le rapport.
8. Cliquez sur **Save Settings** si les résultats sont satisfaisants. Si les résultats ne sont pas satisfaisants, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Répétez les étapes.
  - Annulez les résultats en fermant l'espace de travail **MS Tune**.
  - Restaurez les paramètres précédents en sélectionnant le fichier de sauvegarde approprié dans le menu **Restore Instrument Data**.
  - Contactez [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support).

## Régler l'option Q1 High

Dans les expériences MS/MS, la zone Q1 est utilisée pour sélectionner un ion précurseur pour la fragmentation. Le réglage de l'option Q1 High optimise la largeur de pic et étalonne la masse Q1. Q1 High représente une fenêtre de sélection de l'ion précurseur plus étroite.

---

**Remarque** : Si le spectromètre de masse est configuré avec un CDS, le logiciel démarre automatiquement ce dernier au début de l'étape Achieve Stable Spray. Le logiciel arrête le CDS lorsque l'utilisateur ferme l'espace de travail MS Tune.

---

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **Positive Q1 High Tuning** ou **Negative Q1 High Tuning** dans la liste **Tuning Procedures**.

---

**Remarque** : Si la procédure Positive Q1 High n'a pas été effectuée pendant une certaine période, cliquez sur **Copy** afin d'utiliser les paramètres Positive Q1 Unit en point de départ.

---

3. Assurez-vous que la pulvérisation est stable.
4. Cliquez sur **Next**.
5. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
6. (Facultatif) Cliquez sur **Edit Method** pour modifier les paramètres.
7. Si un étalonnage a été effectué, cliquez sur **Confirm** afin de réaliser une acquisition de confirmation.
8. Cliquez sur **Next**.
9. (En option) Enregistrez le rapport.
10. Cliquez sur **Next**.
11. Cliquez sur **Save Settings**.

## Étalonner Zeno (Systèmes ZenoTOF)

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **Positive Zeno Calibration** ou **Negative Zeno Calibration** dans la liste **Tuning Procedures**.  
La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif et les conditions requises pour le processus d'étalonnage.
3. Assurez-vous que la pulvérisation est stable, puis cliquez sur **Next**.

---

**Remarque** : L'utilisateur peut ajuster manuellement les **Source and Gas Parameters** sur la page Achieve Stable Spray/Modify.

---

4. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.

5. Cliquez sur **Next**.
6. (En option) Enregistrez le rapport en suivant ces étapes :
  - a. Sur la page Report, cliquez sur **Save report as**.
  - b. Accédez au dossier souhaité pour enregistrer le rapport, saisissez un **File name**, puis cliquez sur **Save**.
7. Cliquez sur **Next**.
8. Cliquez sur **Save Tuning Settings** si les résultats sont satisfaisants. Si les résultats ne sont pas satisfaisants, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Répétez les étapes.
  - Annulez les résultats en fermant l'espace de travail **MS Tune**.
  - Restaurez les paramètres précédents en sélectionnant le fichier de sauvegarde approprié dans le menu **Restore Instrument Data**.

### Réaliser l'optimisation EAD (Systèmes ZenoTOF)

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **EAD Optimization** dans la liste **Tuning Procedures**.  
La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif et les conditions requises pour le processus d'optimisation.
3. Sélectionnez **Tuning process**, puis cliquez sur **Next**.
4. Sur la page Filament Calibration Verification, sélectionnez le **Filament** et cliquez sur **Calibrate Filament**.

---

**Conseil !** Pour modifier le filament sélectionné, cliquez sur la liste dans le champ **Filament**, puis sélectionnez le filament requis.

---

5. Cliquez sur **Next**.
6. Assurez-vous que la pulvérisation est stable, puis cliquez sur **Next**.

---

**Remarque :** L'utilisateur peut ajuster manuellement les **Source and Gas Parameters** sur la page Achieve Stable Spray/Modify.

---

7. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
8. Cliquez sur **Next**.
9. (En option) Enregistrez le rapport en suivant ces étapes :
  - a. Sur la page Report, cliquez sur **Save report as**.
  - b. Accédez au dossier souhaité pour enregistrer le rapport, saisissez un **File name**, puis cliquez sur **Save**.
10. Cliquez sur **Next**.
11. Cliquez sur **Save Settings**.

## Réaliser une réduction du bruit de fond EI EAD (Systèmes ZenoTOF)

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **EAD EI Background Reduction** dans la liste **Tuning Procedures**.  
La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif et les conditions requises pour la procédure de réglage.
3. Cliquez sur **Next**.
4. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.
5. Cliquez sur **Next**.
6. (En option) Enregistrez le rapport en suivant ces étapes :
  - a. Sur la page Report, cliquez sur **Save report as**.
  - b. Accédez au dossier souhaité pour enregistrer le rapport, saisissez un **File name**, puis cliquez sur **Save**.

## Réaliser le diagnostic EAD (Systèmes ZenoTOF)

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **EAD Diagnostics** dans la liste **Tuning Procedures**.  
La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif et les conditions requises pour le diagnostic EAD.
3. Cliquez sur **Next**.
4. Suivez les instructions à l'écran pour chaque étape. Consultez le document : *Système d'aide*.

## Réaliser l'initialisation ADC (Systèmes ZenoTOF)

1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Sélectionnez **Tuning Procedures > ADC Initialization**.  
La page Introduction s'affiche. Elle décrit l'objectif de l'initialisation.
3. Cliquez sur **Next**.  
La page ADC Initialization apparaît. Consultez le document : *Système d'aide*.

## Restaurer les données de l'instrument

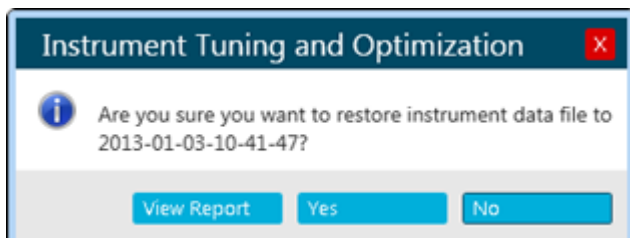
Le logiciel génère une copie du fichier de données instrumentales (dat) et actualise le fichier dat courant à chaque fois que l'utilisateur sauvegarde les paramètres d'ajustement à la fin de chaque procédure d'ajustement. Les paramètres sauvegardés précédemment peuvent être restitués en utilisant l'option **Restore Instrument Data**.

Lorsque chaque procédure d'optimisation est effectuée, le rapport et les fichiers de données sont générés pour repérer les résultats optimisés. Par défaut, les fichiers de données wiff2 et le rapport sont disponibles sur D:\SCIEX OS Data\Optimization.



1. Ouvrez l'espace de travail MS Tune.
2. Depuis le menu **Restore Instrument Data**, sélectionnez un fichier dat avec un horodatage antérieur à restaurer.

### Illustration 5-7 : Boîte de dialogue Instrument Tuning and Optimization



3. (Facultatif) Affichez le rapport pour le fichier dat à restaurer en suivant ces étapes :
  - a. Cliquez sur **View Report**.
  - b. Si un rapport a été généré pour le fichier de données d'instrument sélectionné, naviguez jusqu'au fichier de rapport et double-cliquez dessus pour l'ouvrir.
4. Cliquez sur **Yes**.

## Espace de travail Explorer

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

### Ouvrir les échantillons

Avant d'exécuter des tâches de révision des données dans l'espace de travail Explorer, ouvrez les échantillons à réviser.

1. Ouvrez l'espace de travail Explorer.
2. Pour ouvrir un échantillon unique, respectez les étapes suivantes :
  - a. Cliquez sur **File > Open Sample**.  
La boîte de dialogue Select Sample s'ouvre.
  - b. Naviguez jusqu'à l'échantillon à ouvrir, puis sélectionnez-le.
  - c. Cliquez sur **OK**.
3. Pour ouvrir plusieurs échantillons, respectez les étapes suivantes :
  - a. Cliquez sur **File > Open Multiple Samples**.
  - b. Dans la boîte de dialogue Select Samples, sélectionnez les échantillons dans la liste **Available**, puis cliquez sur la flèche pour déplacer les fichiers vers la liste **Selected**.

---

**Conseil !** Pour sélectionner un seul échantillon, cliquez dessus, puis cliquez sur la flèche.

---

- c. Cliquez sur **OK**.

### Vérifier la présence d'un analyte

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons</a>.</li></ul> |
|--|

1. Extraire des ions. Consulter la section : [Extraire des ions](#).
2. (Facultatif) Afficher le tableau des données et des pics. Se reporter à la section : [Afficher un tableau des données et des pics](#).
3. Examinez l'aire de pic, l'intensité, les masses et modifiez les états des composés.

Pour les systèmes SCIEX Triple Quad, l'état de charge n'est disponible que pour les types de données de balayages complets.

## Extraire des ions

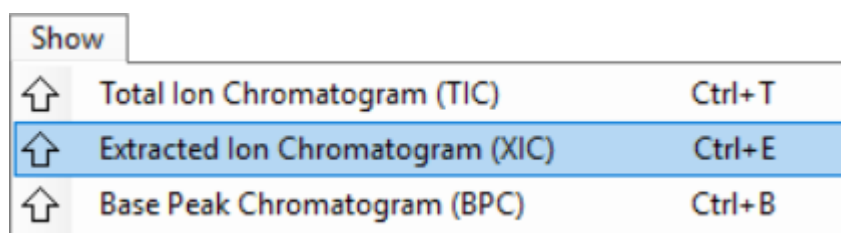
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

Permet de calculer un ou plusieurs chromatogrammes d'ions extraits superposés (XIC), c'est-à-dire le tracé de la somme d'intensité sur une plage de masses donnée en tant que fonction du temps de rétention.

1. Cliquez sur **Show > Extract Ion Chromatogram (XIC)**.

### Illustration 6-1 : Menu Show : Chromatogramme des ions extraits (XIC)



2. Si la boîte de dialogue Specify XIC Ranges apparaît, respectez les étapes suivantes :
  - a. Saisissez les valeurs **Center**, **Width** et **Compound** ou importez les valeurs.

---

**Remarque :** Le titre par défaut du XIC comprend les noms de composé affichés dans les cellules pour une ligne donnée.

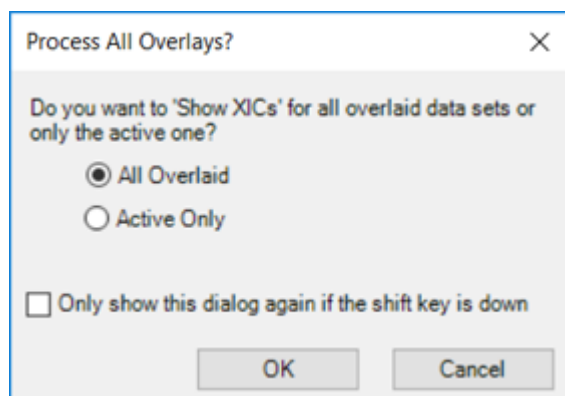
---

**Conseil !** En mode **Center/Width**, il est possible de spécifier une formule chimique plutôt qu'une masse pour la valeur **Center**. Lorsqu'une composition neutre, telle que H<sub>2</sub>O, est utilisée, un proton est automatiquement ajouté pour le mode positif ou soustrait pour le mode négatif. Par exemple, le ratio *m/z* de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> est utilisé pour le mode positif. Spécifiez un état de charge spécifique en terminant la composition par « +*n* » ou « -*n* » où *n* est l'état de charge. Si le *n* est omis, on suppose qu'il est de un. Par exemple, si H<sub>2</sub>ONa<sup>+</sup> est spécifié, le ratio *m/z* de H<sub>2</sub>ONa<sup>+</sup> est utilisé en l'état.

---

- b. (Facultatif) Utilisez les fonctions du menu contextuel pour personnaliser les options pour l'extraction d'ions. Pour plus d'informations, consultez le document : *Système d'aide*.
- c. Cliquez sur **OK**.  
Si le graphique actif contient une série superposée de différents échantillons, la boîte de dialogue Process All Overlays? s'ouvre..

**Illustration 6-2 : Boîte de dialogue Process All Overlays?**



3. Si la boîte de dialogue Select MRMs apparaît, sélectionnez les MRM à inclure dans le XIC, puis cliquez sur **OK**.
4. Si la boîte de dialogue Process All Overlays? apparaît, procédez comme suit :
  - a. Effectuez l'une des opérations suivantes :
    - Sélectionnez **All Overlaid** pour générer des XIC superposés pour tous les échantillons disponibles.
    - Sélectionnez **Active Only** pour générer des XIC uniquement à partir de l'échantillon actif.
  - b. Cliquez sur **OK**.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.

## Ouvrir un chromatogramme en courant ionique total

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons</a>.</li></ul> |
|--|

Un chromatogramme en courant ionique total (TIC) est créé en additionnant les contributions d'intensité de tous les ions provenant d'une série de balayages de masse. Utilisez le TIC pour afficher un ensemble de données complet dans une même fenêtre. Le TIC se compose de la somme des intensités de tous les ions dans un balayage tracé en fonction du temps dans un volet chromatographique.

1. Cliquez sur **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.  
Si le graphique actif contient une série superposée de différents échantillons, la boîte de dialogue Process All Overlays? s'ouvre.
2. Si la boîte de dialogue Process All Overlays? apparaît, procédez comme suit :
  - a. Effectuez l'une des opérations suivantes :

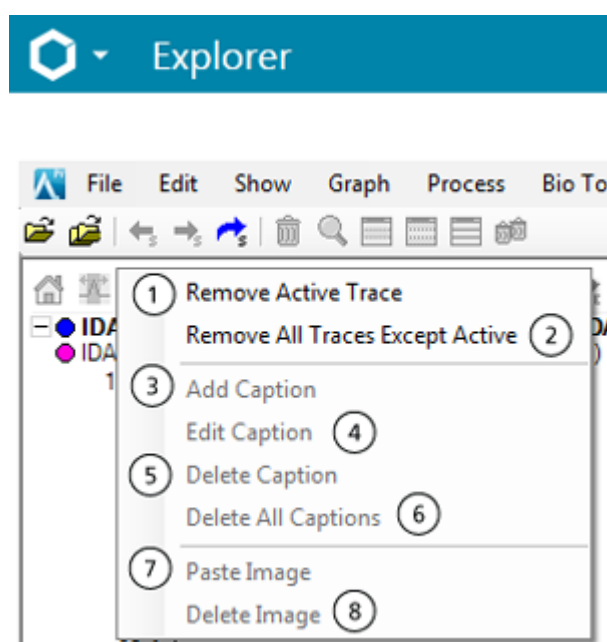
- Sélectionnez **All Overlaid** pour générer des TIC superposés pour tous les échantillons disponibles.
- Sélectionnez **Active Only** pour générer des TIC uniquement à partir de l'échantillon actif.

b. Cliquez sur **OK**.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.

3. Cliquez avec le bouton droit dans le TIC, puis utilisez les fonctions du menu contextuel.

### Illustration 6-3 : Menu contextuel Total Ion Chromatogram



Élément	Description
1	Disponible uniquement lorsque plusieurs tracés superposés sont disponibles. Supprime du graphique le tracé actuellement actif. Pour supprimer un tracé qui n'est pas actuellement actif, activez-le, puis sélectionnez la fonction.
2	Disponible uniquement lorsque plusieurs tracés superposés sont disponibles. Supprime tous les tracés, à l'exception du tracé actuellement actif. Si le tracé à conserver n'est pas actif actuellement, activez-le et sélectionnez la fonction.

Élément	Description
3	<p>Ajoute du texte à un graphique.</p> <p>Si nécessaire, cliquez sur <b>Font</b> pour régler les propriétés de police, puis sur <b>OK</b>. La légende est ajoutée à la position (x, y) où l'utilisateur a cliqué avec le bouton droit pour ouvrir le menu.</p> <p>Une fois la légende ajoutée, l'utilisateur peut la faire glisser vers un nouvel emplacement. Si l'utilisateur la fait glisser dans l'axe des X ou des Y, ceci annule alors l'opération de déplacement.</p> <p>Les séquences de caractères « \d » et « \u » font l'objet d'un traitement spécial. Dans le premier cas, le caractère qui suit immédiatement est dessiné comme un indice et dans le second cas, comme un exposant. Dans les deux cas, les caractères spéciaux ne sont pas visibles. Ceci est particulièrement utile pour les formules chimiques. Par exemple, « H\d3O\u+ » apparaît comme H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>.</p>
4	Modifie la légende sélectionnée. L'utilisateur peut aussi ouvrir cette boîte de dialogue en double-cliquant sur une légende.
5	Supprime la légende sélectionnée. Vous pouvez aussi faire glisser la légende hors du graphique pour la supprimer.
6	Disponible si le graphique contient au moins une légende. Supprime toutes les légendes à la fois.
7	Colle une image dans le graphique.
8	Supprime l'image sélectionnée du graphique.

## Ouvrir un chromatogramme de pics de base (BPC)

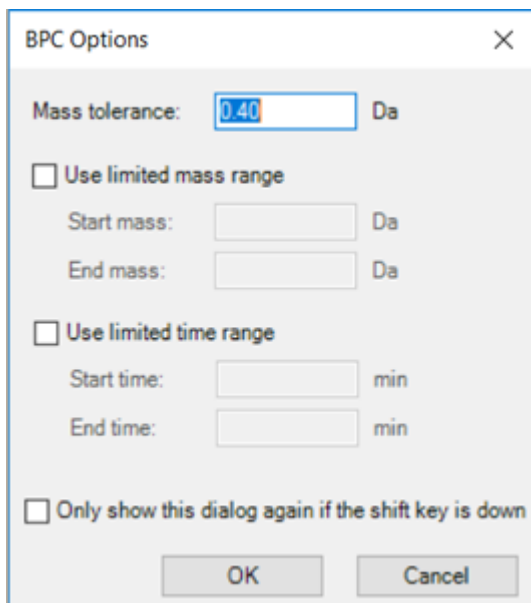
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

Génère un tracé de l'intensité du pic le plus large dans chaque spectre en tant que fonction de temps.

1. Cliquez sur **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.

Illustration 6-4 : Boîte de dialogue BPC Options



2. Renseignez les champs dans la boîte de dialogue BPC Options. Pour des informations sur les champs, consultez le document : *Système d'aide*.

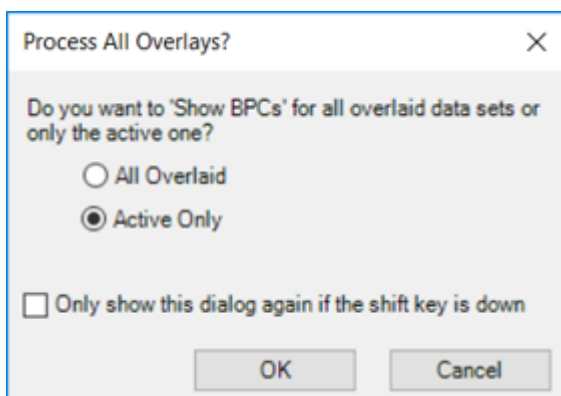
---

**Remarque :** Si un chromatogramme avec une sélection unique couvrant plus de 1,0 minute est actif lorsque le chromatogramme des pics de base est en cours de génération, la plage de temps par défaut est alors celle de la sélection. Dans le cas contraire, la dernière plage de temps est utilisée. La plage de temps limitée évite à l'utilisateur de saisir manuellement la plage.

---

Si le graphique actif contient une série superposée de différents échantillons, la boîte de dialogue Process All Overlays? s'ouvre..

Illustration 6-5 : Boîte de dialogue Process All Overlays?



3. Si la boîte de dialogue Process All Overlays? apparaît, procédez comme suit :
  - a. Effectuez l'une des opérations suivantes :

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

- Sélectionnez **All Overlaid** pour générer des BPC superposés pour tous les échantillons disponibles.
- Sélectionnez **Active Only** pour générer des BPC uniquement à partir de l'échantillon actif.

b. Cliquez sur **OK**.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.

## Afficher un tableau des données et des pics

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons</a>.</li></ul> |
|--|

Le tableau des données et des pics contient deux tableaux différents. Le tableau des données indique les valeurs (X, Y) brutes composant un ensemble de données et le tableau des pics indique des informations sur les pics eux-mêmes. Le tableau est généré quand le graphique est actif.

---

**Remarque** : Seuls les pics supérieurs au seuil actuel du graphique, défini à l'aide de la flèche bleue sur l'axe des Y du graphique, sont présents. Consulter la section : [Travailler avec des données dans des graphiques](#)

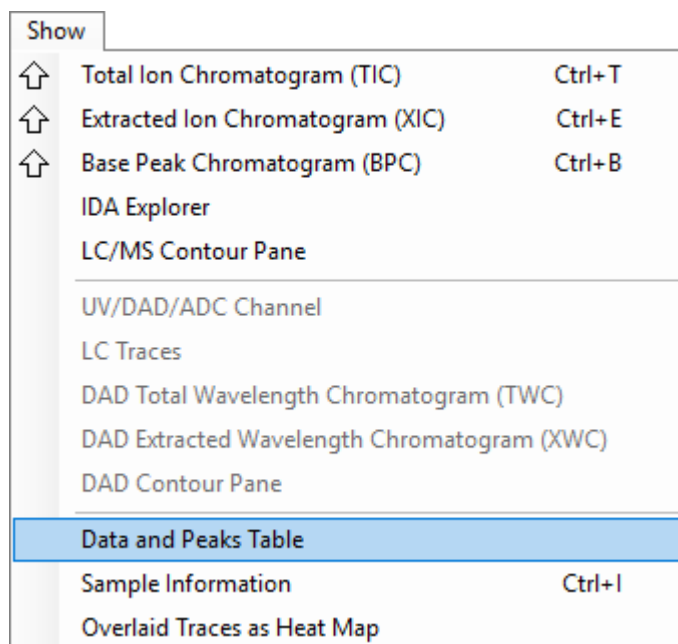
---

Cette fonction permet d'afficher une fenêtre contenant deux tableaux pour les données actuellement actives : un tableau pour les valeurs brutes (X, Y) et un autre pour la liste des pics.

1. Cliquez sur **Show > Data and Peaks Table**.



Illustration 6-6 : Menu Show : Data and Peaks Table



2. Utilisez les fonctions du tableau suivant.

Tableau 6-1 : Fonctions de Data and Peaks Table

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Trier le tableau en fonction de ce champ.	Cliquez sur l'en-tête de colonne.
Copier les cellules actuellement sélectionnées.	Cliquez avec le bouton droit dans le tableau, puis cliquez sur <b>Copy</b> . Si l'onglet Data est actif, les valeurs X et Y sélectionnées sont alors copiées. Si l'onglet Peaks est actif, les informations relatives au pic sélectionnées sont alors copiées.
Copier uniquement les lignes sélectionnées.	Sélectionnez d'abord les lignes en faisant glisser la colonne du sélecteur de ligne ou à l'aide des touches <b>Shift</b> ou <b>Ctrl</b> pour sélectionner plusieurs lignes. Cliquez alors avec le bouton droit dans le tableau, puis cliquez sur <b>Copy</b> .
Sélectionner plusieurs colonnes.	Maintenez la touche <b>Ctrl</b> enfoncée, puis cliquez sur les en-têtes de colonne. Si l'utilisateur clique simplement sur un en-tête de colonne, la colonne est alors triée.
Copier tout le tableau.	Cliquez sur <b>Edit &gt; Select All</b> , puis sur <b>Edit &gt; Copy</b> .
Exporter les données en tant que texte.	Cliquez avec le bouton droit dans la fenêtre puis sur <b>Export Data as Text</b> .  Enregistre toute la liste de données dans le fichier spécifié. Les valeurs X et Y sont séparées par une tabulation et un retour à la ligne est effectué après chaque paire (X, Y).

Tableau 6-1 : Fonctions de Data and Peaks Table (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Exporter les données de la liste de pics en tant que texte..	Cliquez avec le bouton droit dans la fenêtre puis sur <b>Export Peak List as Text</b> .  Enregistre toute la liste de pics dans le fichier spécifié. Cela ne comprend pas les pics qui se trouvent sous le seuil actuel défini dans l'axe Y du graphique associé. Les métriques de pic sont séparées par une tabulation et un retour à la ligne est effectué après chaque pic.

3. Examinez l'aire de pic, l'intensité, les masses et modifiez les états des composés.

## Afficher les informations sur l'échantillon

### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons](#).

Le volet Sample Information affiche une description textuelle de l'expérience utilisée pour acquérir les données actives. Ces informations incluent des informations spécifiques à l'échantillon, y compris le nom de l'échantillon et des informations sur l'acquisition des données, telles que le nombre et le type des expériences.

Si deux ou plusieurs volets Sample Information, associés à des échantillons différents provenant du même fichier de données, sont visibles, un clic sur un élément de l'arborescence pour l'un ou l'autre des volets fait alors défiler tous les autres volets jusqu'à la section correspondante. Ceci suppose que des sections portant le même nom existent dans tous les volets. Cette fonctionnalité est utile si l'utilisateur souhaite comparer deux fenêtres d'informations sur les échantillons similaires, mais pas identiques.

Cliquez sur **Show > Sample Information**.

## Afficher les informations de sélection de graphique

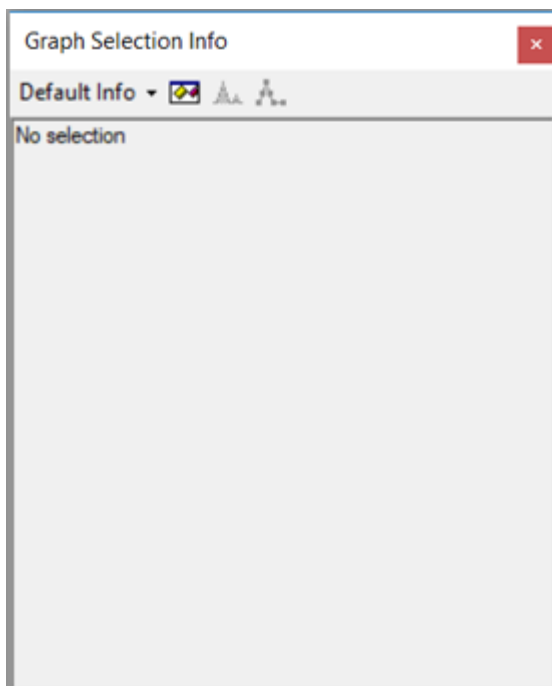
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons](#).

La boîte de dialogue Graph Selection Information affiche des informations concernant la région sélectionnée dans un chromatogramme ou un spectre qui sont générées lorsque l'un de ces volets est actif.

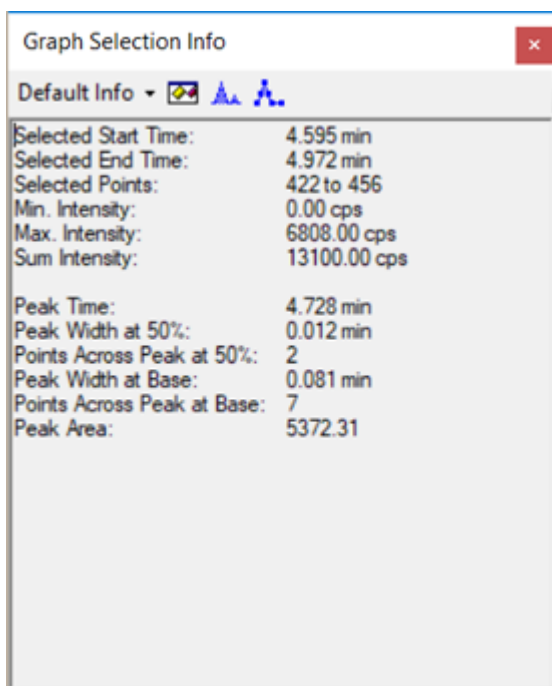
1. Cliquez sur **Window > Graph Selection Window**.

Illustration 6-7 : Boîte de dialogue Graph Selection Info



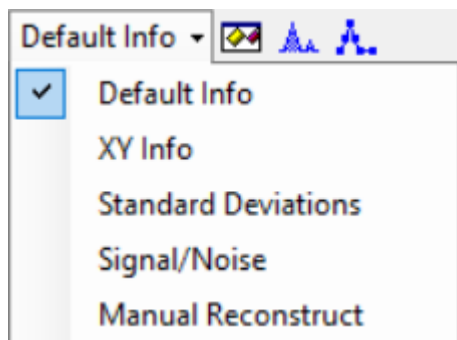
2. Réalisez une ou plusieurs sélections dans le chromatogramme ou le graphique du spectre.

Illustration 6-8 : Boîte de dialogue Graph Selection Info



3. Sélectionnez une option dans la liste : **Default Info**, **XY Info**, **Standard Deviations**, **Signal/Noise** ou **Manual Reconstruct**, le cas échéant.

Illustration 6-9 : Sélection d'options d'information



Pour une description des champs dans la boîte de dialogue, consultez le document : *Système d'aide*.

4. (Facultatif) Calculez manuellement le ratio signal sur bruit.
  - a. Sélectionnez un chromatographe ou, dans le flux de travail de reconstruction de masse, un graphique de reconstruction.
  - b. Sélectionnez la région de bruit et le pic ciblé en utilisant la clé **Shift** pour réaliser plusieurs sélections.
  - c. Sélectionnez **Default Info > Signal/Noise**.
5. (Facultatif) Cliquez sur **Options** (📊), définissez les options Graph Info, puis cliquez sur **OK**. Pour une description des options, consultez le document : *Système d'aide*.  
Par exemple, pour utiliser 3 Sigma comme multiplicateur de bruit, définissez **Noise multiplier for S/N** sur **3**.
6. (Facultatif) Cliquez sur **Fill Peaks** (📊).  
Le graphique actif bascule entre un mode dans lequel les pics sont remplis à l'aide de remplissages sombres et clairs alternés et un mode dans lequel ils ne le sont pas. Cette fonction est utile si l'utilisateur veut voir l'étendue de pic correspondant à la **Peak Width at Base**.
7. (Facultatif) Cliquez sur **Show Point Symbols** (📊).  
Tous les spectres dans le volet actif basculent entre un mode dans lequel les points de données sont indiqués par des symboles de points et un mode dans lequel ils ne le sont pas. Cette fonction est utile si l'utilisateur examine de près un pic et souhaite voir combien de points de données il comporte au lieu d'utiliser seulement les informations textuelles affichées dans la fenêtre principale.

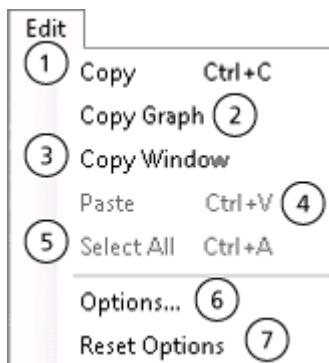
## Modifier des paramètres dans des graphiques

### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons](#).

Cliquez sur **Edit** puis utilisez les fonctionnalités dans le menu **Edit**.

Illustration 6-10 : Menu Edit : Options



Élément	Description
1	Copie les données actuelles dans le presse-papiers. Lorsqu'un spectre ou un chromatogramme est actif, une image de ce graphique actif est copiée.
2	Lorsqu'un spectre ou un chromatogramme est actif, copie le graphique actuel dans le presse-papiers comme image.
3	Copie une image de l'intégralité de la fenêtre active dans le presse-papiers. La barre de titre de la fenêtre et les barres d'outils de ses différents volets ne sont pas incluses.
4	Colle les données du presse-papiers dans la vue actuelle.
5	Lorsqu'un tableau est actif, sélectionne toutes les lignes du tableau. Lorsqu'un volet de texte est actif, sélectionne tout le texte.
6	Permet à l'utilisateur de définir des options concernant l'aspect du graphique, le marquage et la recherche des pics, le traitement automatique et le calcul des plages de XIC. Consulter la section : <a href="#">Régler les options.</a>
7	Restaure les options par défaut de l'explorateur. Consulter la section : <a href="#">Réinitialiser les options.</a>

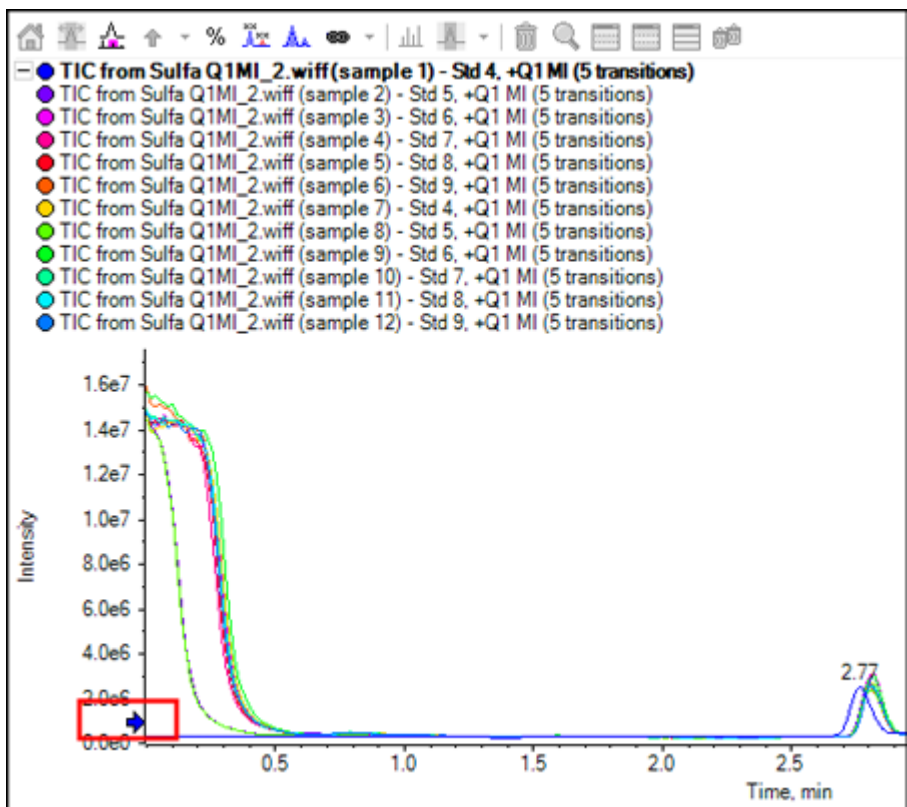
## Travailler avec des données dans des graphiques

### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

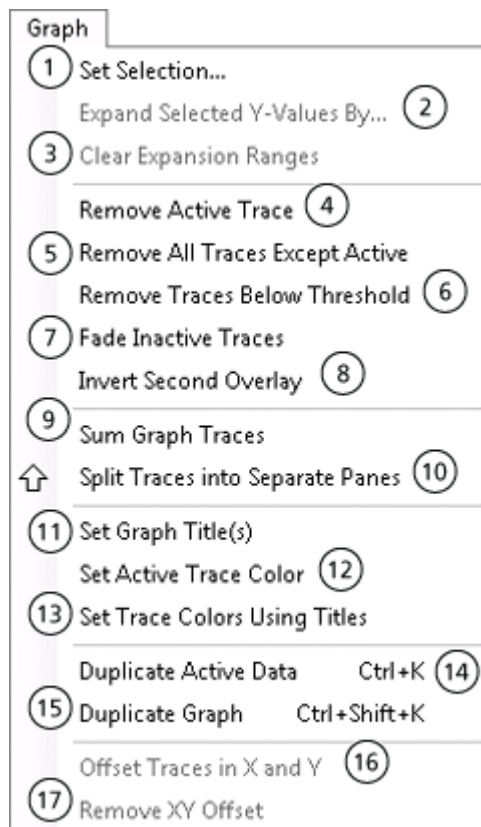
1. Pour définir le seuil pour le marquage des pics et les fonctions ultérieures telles que le tableau **Data and Peaks**, faites glisser la flèche bleue qui apparaît sur l'axe des Y des graphiques.

Illustration 6-11 : Flèche bleue sur l'axe des Y



2. Utilisez les fonctions du menu **Graph**.

Illustration 6-12 : Menu Graph : options



Élément	Description
1	<p>Sélectionne les portions des graphiques à traiter lors des opérations ultérieures. Par exemple, sélectionnez une zone dans un chromatogramme, puis double-cliquez pour obtenir un spectre moyen. Utilisez la fonction <b>Set Selection</b> pour saisir des plages X spécifiques afin que les sélections puissent être définies plus précisément que cela n'est possible avec le curseur.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li> Cliquez sur <b>Graph &gt; Set Selection</b>. La boîte de dialogue Set Selection apparaît.</li> <li> Saisissez les valeurs <b>Center</b> et <b>Width</b>.</li> <li> Cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol> <p><b>Conseil !</b> Pour définir manuellement les sélections dans un graphique, faites glisser le curseur dans la région de tracé pour faire une sélection. Si la touche <b>Shift</b> est maintenue enfoncée, les sélections actuelles sont conservées.</p>

Élément	Description
2	<p>Développe les valeurs Y dans une plage selon un facteur spécifié à des fins de tracé.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Ouvrez un ou plusieurs échantillons.</li> <li>Sélectionnez une portion du graphique.</li> <li>Cliquez sur <b>Graph &gt; Expand Selected Y-Values by</b>. La boîte de dialogue Expand Selection apparaît.</li> <li>Saisissez le facteur d'expansion.</li> <li>Cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol>
3	<p>Supprime toutes les plages de développement.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique présentant des plages développées, cliquez sur <b>Graph &gt; Clear Expansion Ranges</b>.</li> </ul>
4	<p>Supprime du graphique le tracé actuellement actif. Cette fonction est disponible lorsqu'il existe plusieurs tracés superposés.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Remove Active Trace</b>.</li> </ul>
5	<p>Supprime tous les tracés, à l'exception du tracé actuellement actif. Cette fonction est disponible lorsqu'il existe plusieurs tracés superposés.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Remove All Traces Except Active</b>.</li> </ul>
6	<p>Supprime les tracés superposés du graphique pour lesquels tous les points de données se situent sous le paramètre de seuil actuel.</p> <p>Si l'utilisateur a agrandi le graphique de telle sorte que seule une partie de la plage des X est actuellement visible, une boîte de dialogue s'ouvre. L'utilisateur peut choisir de supprimer les tracés inférieurs au seuil en utilisant la totalité de la plage ou seulement la partie actuellement visible.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Remove Traces Below Threshold</b>.</li> </ul>
7	<p>Lorsque le graphique actif contient plusieurs tracés superposés, dessine tous les tracés, à l'exception du tracé actuellement actif, en utilisant une couleur plus pâle et moins intense que la normale. Utilisez cette fonction pour souligner le tracé actif. Les tracés inactifs sont moins distrayants. Pour revenir au style d'origine, sélectionnez de nouveau la fonction.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Fade Inactive Trace</b>.</li> </ul>



Élément	Description
8	Lorsque le graphique actif contient plusieurs tracés superposés, inverse le deuxième tracé. Cela peut faciliter la comparaison visuelle de deux tracés similaires. Sélectionnez de nouveau <b>Invert Second Overlay</b> pour retourner à la vue initiale.
9	Remplace les graphiques par un seul tracé qui est la somme de l'ensemble des différents tracés. <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique actif comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Sum Graph Traces</b>.</li> </ul>
10	Crée un graphique pour chaque superposition. Par exemple, si l'utilisateur commence par un graphique contenant trois tracés superposés, puis qu'il sélectionne cette fonction, le résultat final contiendra quatre volets : le graphique initial avec les superpositions et un graphique pour chacun des ensembles de données individuels. <ol style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique actif comprenant plusieurs tracés superposés, cliquez sur <b>Graph &gt; Split Traces into Separate Panes</b>. La boîte de dialogue Number of Columns apparaît.</li> <li>Sélectionnez le nombre de colonnes dans la sortie. Le nombre de lignes requis est déterminé en fonction du nombre de lignes et du nombre de tracés superposés.</li> <li>Cochez cette case pour ouvrir les volets dans une nouvelle fenêtre. Si la case n'est pas cochée, les volets sont ouverts dans la même fenêtre.</li> </ol>
11	Ouvre la boîte de dialogue Set Titles. Utilisez cette option pour modifier manuellement les titres des tracés.
12	Ouvre la boîte de dialogue Color. Utilisez cette option pour définir la couleur du tracé actuellement actif du graphique.
13	Ouvre la boîte de dialogue Set Trace Colors Using Titles. Lorsque plusieurs tracés du graphique sont superposés, le logiciel utilise les couleurs par défaut pour les superpositions. Utilisez cette option pour définir des couleurs spécifiques pour les tracés dont le titre contient un texte spécifique.
14	Crée une copie des données du graphique actif, puis l'ajoute à ce graphique. Utilisez cette fonction pour voir l'effet d'une opération particulière de traitement des données. Par exemple, si l'utilisateur duplique les données en utilisant cette fonction, puis lisse l'un des deux tracés, le graphique obtenu contient des vues avant et après superposées. <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique actif, cliquez sur <b>Graph &gt; Duplicate Active Data</b>.</li> </ul>

Élément	Description
15	<p>Crée une copie du graphique actif. Utilisez cette fonction pour voir l'effet d'une opération particulière de traitement des données. Par exemple, si l'utilisateur duplique les données à l'aide de cette fonction, puis lisse l'un des deux tracés, des vues avant et après sont présentées dans deux graphiques distincts. Liez les axes des X afin qu'un zoom sur un graphique provoque automatiquement un zoom sur l'autre.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dans un graphique actif, cliquez sur <b>Graph &gt; Duplicate Graph</b>.</li> </ul>
16	Ouvre la boîte de dialogue Offset Traces. Utilisez cette option pour créer un graphique empilé en trois dimensions à partir d'une série de tracés de graphique superposés.
17	Supprime les décalages générés du TIC.

## Utiliser les outils de fonctionnement de deux volets

### Procédures préalables

- Ouvrez l'espace de travail Explorer.

Utilisez les icônes qui bordent le côté droit des volets pour exécuter des opérations sur les deux volets, le volet source et le volet cible. Consulter la section : [Tableau 6-2](#). Dans tous les cas, cliquez sur l'icône dans le volet source, puis faites-la glisser vers le volet cible.

**Tableau 6-2 : Outils pour deux volets**


Icône	Nom	Description
	Move Pane	<p>Permet de modifier les positions relatives des volets. Apparaît dans l'angle supérieur droit de chaque volet. Cliquer sur l'icône dans un volet, puis la faire glisser vers le haut, le bas, la gauche ou la droite d'un deuxième volet. Selon l'endroit où le curseur est relâché, le premier volet change de position par rapport au second. Lorsque l'utilisateur fait glisser le volet, un côté du deuxième volet est mis en surbrillance en rouge pour indiquer l'endroit où le premier volet sera placé.</p> <p><b>Remarque</b> : L'utilisateur peut aussi faire glisser des volets d'une fenêtre dans une autre.</p>

Tableau 6-2 : Outils pour deux volets (suite)




Icône	Nom	Description
	Add Data	<p>Ajoute deux ensembles de données, point par point. Les données du volet source sur lesquelles vous avez initialement cliqué sont ajoutées dans le volet cible, celui sur lequel l'icône déplacée est relâchée. Le titre du volet modifié est mis à jour pour indiquer qu'il a été modifié.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Seuls deux ensembles de données du même type peuvent être additionnés. Par exemple, l'utilisateur ne peut pas ajouter un spectre à un chromatogramme.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Si le graphique cible contient plusieurs tracés superposés, par défaut, les données sources sont alors ajoutées uniquement aux données cibles actives. Maintenez la touche <b>Ctrl</b> enfoncée pour ajouter la source à tous les ensembles de données dans le volet cible.</p>
	Subtract Data	<p>Soustrait le bruit de fond d'un spectre de masse. Similaire à l'icône <b>Add Data</b>, si ce n'est que les données sources sont soustraites des données cibles.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Si le graphique cible contient plusieurs tracés superposés, par défaut, les données sources sont alors soustraites uniquement des données cibles actives. Maintenez la touche <b>Ctrl</b> enfoncée pour ajouter la source à tous les ensembles de données dans la cible.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Normalement, tous les points de données pour lesquels l'intensité dans la source est plus importante que dans la cible ne sont pas conservés. En d'autres termes, les valeurs Y négatives sont écartées. Maintenez la touche <b>Shift</b> enfoncée pour conserver les points d'intensité négative.</p>

Tableau 6-2 : Outils pour deux volets (suite)

Icône	Nom	Description
	Overlay Data	<p> Superpose les données actives dans le graphique source sur le graphique cible. Une fois l'opération terminée, le graphique cible contiendra une nouvelle série avec une copie des données cible.</p> <p><b>Conseil !</b> Si le graphique cible contient plusieurs tracés superposés, par défaut, seule une copie de ses données actives est alors déplacée vers le graphique cible. Maintenez la touche <b>Ctrl</b> enfoncée pour superposer une copie de tous les ensembles de données du graphique source sur le graphique cible.</p>

## Déplacer des volets ou des fenêtres

### Procédures préalables

- Ouvrir les échantillons.

Cliquez sur **Window** puis utilisez les fonctionnalités dans le menu **Window**.

Illustration 6-13 : Menu Window : Options



Élément	Description
1	Ouvre une fenêtre contenant des informations relatives à la région sélectionnée dans le graphique actif. Par exemple, la plage des X de la sélection, la plage d'intensité des points sélectionnés, etc. Si cette fenêtre est déjà visible, la sélection de l'élément de menu la ferme. Consulter la section : <a href="#">Afficher les informations de sélection de graphique</a> .
2	Modifie la disposition des informations dans la fenêtre, la faisant passer du format brut au format à colonnes.
3	Supprime le volet actif de sa fenêtre et le place seul dans une nouvelle fenêtre.

Élément	Description
4	Organise les éventuelles fenêtres ouvertes, qui n'ont pas été réduites, afin qu'elles se trouvent toutes côte à côte sur une seule ligne.
5	Organise les éventuelles fenêtres ouvertes, qui n'ont pas été réduites, afin qu'elles se trouvent toutes les unes au-dessus ou en dessous des autres dans une seule colonne.

## Réaliser un lissage gaussien

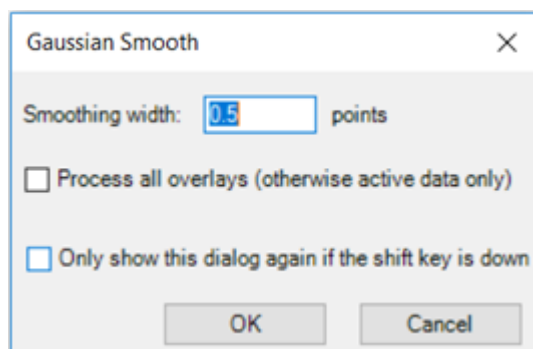
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

Applique un algorithme de lissage gaussien. Il s'agit d'un filtre de largeur spécifiée, où les facteurs de pondération suivent une fonction gaussienne ou normale.

1. Cliquez sur **Process > Gaussian Smooth**.

### Illustration 6-14 : Boîte de dialogue Gaussian Smooth



2. Tapez une valeur dans le champ **Smoothing width**.  
Il s'agit en réalité de la largeur de la fonction gaussienne à la moitié de sa hauteur maximale. La largeur totale est plus importante, car le calcul est exécuté dans les côtés de la courbe gaussienne. Les valeurs fractionnelles sont autorisées, auquel cas la demi-largeur de la courbe gaussienne est inférieure à un point.
3. S'il existe plusieurs tracés dans le graphique actif, sélectionnez **Process all overlays (otherwise active data only)** pour appliquer l'opération à tous les tracés.  
Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.
4. Cliquez sur **OK**.

## Données de seuil

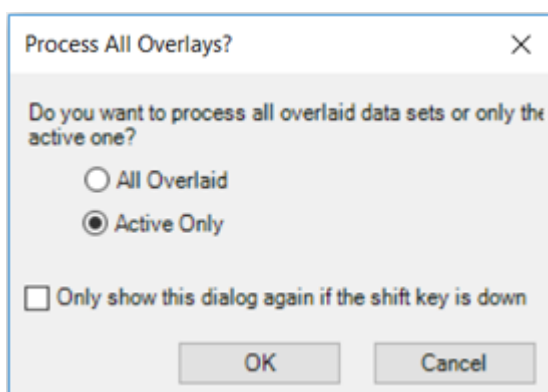
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

Supprime les éventuels points de données dont l'intensité est inférieure au paramètre de seuil actuel. Définit le seuil en faisant glisser la flèche bleue qui apparaît dans les axes des Y des graphiques.

1. Cliquez sur **Process > Threshold Data**.  
Si le graphique actif contient une série superposée de différents échantillons, la boîte de dialogue Process All Overlays? s'ouvre.

### Illustration 6-15 : Boîte de dialogue Process All Overlays?



2. Si la boîte de dialogue Process All Overlays? apparaît, procédez comme suit :
  - a. Effectuez l'une des opérations suivantes :
    - Sélectionnez **All Overlaid** pour générer des TIC superposés pour tous les échantillons disponibles.
    - Sélectionnez **Active Only** pour générer des TIC uniquement à partir de l'échantillon actif.

- b. Cliquez sur **OK**.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.

## Sous-ensemble de données avec sélection de graphique

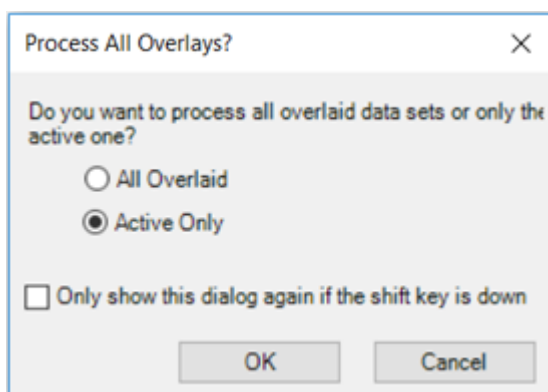
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

Cette fonction n'est disponible que lorsqu'un graphique contenant exactement une région sélectionnée est actif. Supprime les points de données situés hors de la région sélectionnée. Cette fonction permet de concentrer le traitement des données sur un sous-ensemble des données.

1. Effectuez une sélection dans le graphique.
2. Cliquez sur **Process > Subset Data (using graph selection)**.  
Si le graphique actif contient une série superposée de différents échantillons, la boîte de dialogue Process All Overlays? s'ouvre.

#### Illustration 6-16 : Boîte de dialogue Process All Overlays?



3. Si la boîte de dialogue Process All Overlays? apparaît, procédez comme suit :
  - a. Effectuez l'une des opérations suivantes :
    - Sélectionnez **All Overlaid** pour générer des XIC ou TIC superposés pour tous les échantillons disponibles.
    - Sélectionnez **Active Only** pour générer des XIC ou TIC uniquement à partir de l'échantillon actif.
  - b. Cliquez sur **OK**.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.

## Soustraire la référence dans un chromatogramme

### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons.](#)

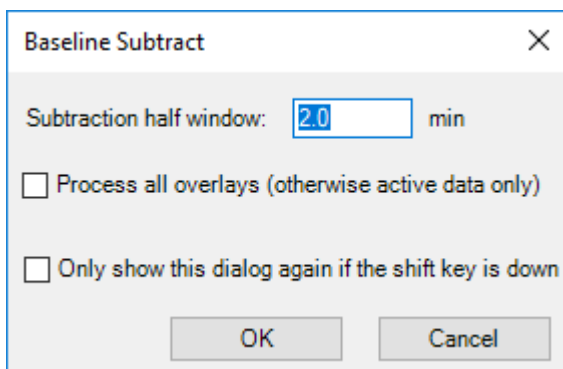
Supprime la ligne de référence d'un chromatogramme qui varie relativement lentement.

Pour chaque point de données dans le chromatogramme, une fenêtre est centrée à la valeur X correspondante et les points présentant le moins d'intensité dans la fenêtre à gauche et à droite sont détectés. Une ligne droite est tracée entre ces deux points et la

valeur Y est calculée au centre de la fenêtre. Il s'agit de la référence qui est supprimée des données à ce point.

1. Cliquez sur **Process > Baseline Subtract Chromatogram**.

### Illustration 6-17 : Boîte de dialogue Baseline Subtract



2. Saisissez une valeur, en minutes, dans le champ **Subtraction half window**.
3. S'il existe plusieurs tracés dans le graphique actif, sélectionnez **Process all overlays (otherwise active data only)** pour appliquer l'opération à tous les tracés. Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.
4. Cliquez sur **OK**.

## Décaler un chromatogramme

Procédures préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons</a>.</li></ul>

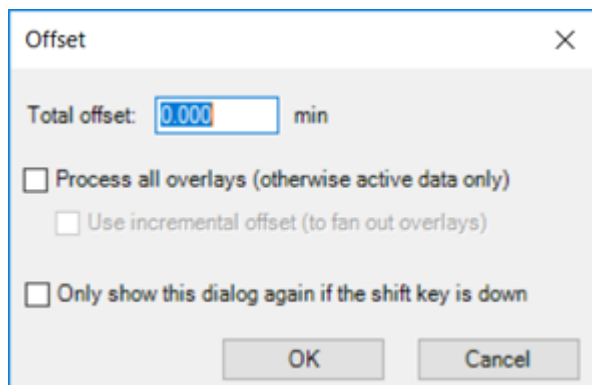


Permet de décaler les valeurs de temps d'un chromatogramme.

1. Cliquez sur **Process > Offset Chromatogram**.



Illustration 6-18 : Boîte de dialogue Offset



2. Saisissez une valeur, en minutes, dans le champ **Total offset**.
3. S'il existe plusieurs tracés dans le graphique actif, sélectionnez **Process all overlays (otherwise active data only)** pour appliquer l'opération à tous les tracés. Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.
4. Sélectionnez **Use incremental offset (to fan out overlays)** pour propager les superpositions dans le temps.
5. Cliquez sur **OK**.

## Spectre du centroïde

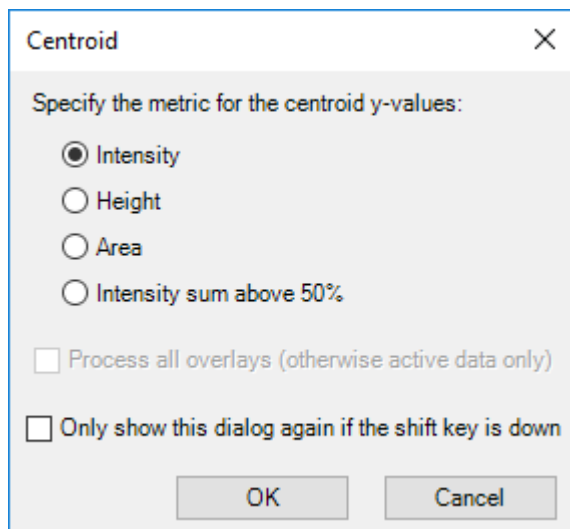
### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons](#).

Crée un centroïde d'un spectre de masse, c'est-à-dire remplace un spectre de profil par des points de masse et d'intensité pour les pics détectés seulement.

1. Cliquez sur **Process > Centroid Spectrum**.

Illustration 6-19 : Boîte de dialogue Centroid



2. Sélectionnez la mesure à utiliser pour le processus de centroïde :
  - **Intensity**: Pour chaque pic, la valeur Y centroïde correspond à l'intensité du plus grand point de données composant le pic.
  - **Height** : Cette mesure est similaire à la mesure Intensity, si ce n'est que l'intensité de la référence est soustraite de l'intensité globale lorsqu'il existe un décalage de la référence.
  - **Area** : Pour chaque pic, la valeur Y centroïde correspond à l'aire totale du pic. Il s'agit d'une véritable valeur intégrale car la valeur rapportée dépend à la fois du profil d'intensité et de la largeur du pic.
  - **Intensity sum above 50%** : Pour chaque pic, la valeur Y correspond à la somme de la portion des intensités composant le pic qui se situent au-dessus de 50 % de l'intensité culminante du pic. Cette valeur est utile, car elle ne dépend pas seulement de l'intensité d'un seul point de données, contrairement aux mesures Intensity et Height, et elle n'est pas influencée par les bords du pic qui pourraient être bruyants ou présenter des interférences.
3. S'il existe plusieurs tracés dans le graphique actif, sélectionnez **Process all overlays (otherwise active data only)** pour appliquer l'opération à tous les tracés. Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, l'action sélectionnée est alors systématiquement utilisée, sauf si l'utilisateur maintient enfoncée la touche **Shift** pour changer l'option.
4. Cliquez sur **OK**.

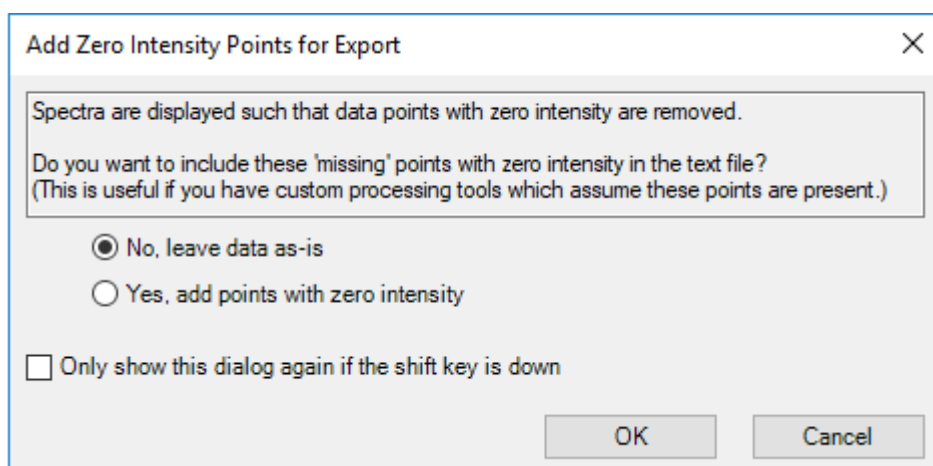
## Exporter les données en tant que texte

<b>Procédures préalables</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons.</a></li></ul>

Le spectre ou le chromatogramme actif est enregistré dans un fichier texte délimité par des tabulations.

1. Cliquez sur **File > Export > Data as Text**.  
En cas d'exportation de données spectrales, la boîte de dialogue Add Zero Intensity Points for Export s'ouvre.

**Illustration 6-20 : Boîte de dialogue Add Zero Intensity Points for Export**



2. Si la boîte de dialogue Add Zero Intensity Points for Export apparaît, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Cliquez sur **No, leave data as-is** pour exclure les points avec une intensité nulle du fichier exporté.
  - Cliquez sur **Yes, add points with zero intensity** pour inclure les points avec une intensité nulle dans le fichier exporté.

Cliquez ensuite sur **OK**.

3. Saisissez un nom de fichier pour le fichier exporté.
4. Cliquez sur **Save**.

## Exporter la liste de pics en tant que texte

### Procédures préalables

- [Ouvrir les échantillons](#).

L'utilisateur peut enregistrer la liste de pics pour le spectre ou le chromatogramme actif dans un fichier texte délimité par des tabulations. Ce fichier contient des informations telles que la valeur X du centroïde (masse ou temps), l'aire de pic, l'amplitude, etc.

1. Cliquez sur **File > Export > Peak List as Text**.
2. Saisissez un nom de fichier pour le fichier exporté.
3. Cliquez sur **Save**.

## Imprimer les données

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Ouvrir les échantillons.</a></li></ul> |
|--|

1. Cliquez sur **File > Print**, puis sélectionnez l'option requise.  
La boîte de dialogue Print s'ouvre.
2. Sélectionnez une imprimante, puis cliquez sur **Print**.

## Réinitialiser les options

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Ouvrez l'espace de travail Explorer.</li></ul> |
|--|

L'utilisateur peut réinitialiser toutes les options aux valeurs par défaut dans l'espace de travail Explorer. Cela comprend les options décrites dans la section précédente, ainsi que les options de traitement. La réinitialisation des options n'affecte que l'utilisateur Windows actuellement connecté, pas les autres utilisateurs du même ordinateur.

1. Cliquez sur **Edit > Reset Options**.  
Une boîte de dialogue de confirmation apparaît.
2. Cliquez sur **OK**.

## Régler les options

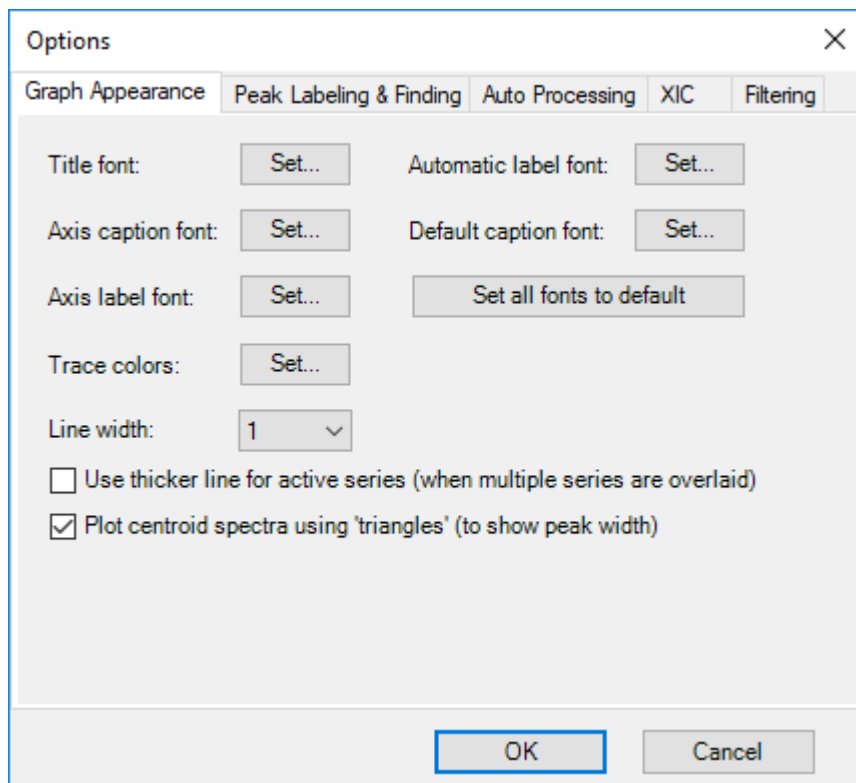
<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Ouvrez l'espace de travail Explorer.</li></ul> |
|--|

Utilisez les fonctions de chaque onglet selon les besoins.

1. Cliquez sur **Edit > Options**.

Illustration 6-21 : Boîte de dialogue Options : Onglet Graph Appearance



2. Définissez les options sur chaque onglet, selon les besoins. Pour des descriptions des options, consultez le document : *Système d'aide*.
3. Cliquez sur **OK**.

## Espace de travail Analytics

L'accès aux fonctionnalités de cet espace de travail est contrôlé par le rôle attribué à l'utilisateur. Consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

**Remarque** : Les moyens contrôlés d'extraction de données de l'espace de travail Analytics sont l'exportation des tableaux de résultats, le transfert vers un LIMS et l'établissement de rapports. Les autres sources de sortie des données, telles que la copie et le collage à partir des tableaux de résultats, ne sont pas contrôlées. N'utilisez pas ces méthodes non contrôlées dans un but réglementaire.

Le groupement des nombres n'est pas pris en charge dans l'espace de travail Analytics. Ne groupez pas des nombres dans des zones de texte, par exemple, dans les paramètres d'intégration, ou une grille, par exemple, des tableaux de résultats.

Les méthodes de traitement comprennent les critères utilisés pour quantifier les pics sélectionnés pour l'intégration.

Les réviseurs doivent passer en revue les données en fonction des critères d'intégration des pics et d'acceptation des données dans les procédures opérationnelles normalisées (SOP) du laboratoire.

SCIEX OS peut traiter des données pendant leur acquisition par SCIEX OS ou le logiciel Analyst. Tout modèle acquis peut être ajouté au tableau de résultats. Pour ajouter des échantillons en cours d'acquisition, attendez la fin de l'acquisition et ajoutez-les au tableau de résultats.

## Définir les paramètres de traitement par défaut pour le projet

Cette option définit les paramètres de recherche de pic par défaut qui sont utilisés lors de la création d'une méthode de traitement. S'il y a plusieurs composants, définissez les valeurs par défaut d'après la chromatographie afin de ne pas avoir à les ajuster individuellement pour chaque composant. Toutefois, aucun ensemble de paramètres ne semble convenir parfaitement à tous les composants ; il pourrait donc s'avérer nécessaire d'ajuster certains paramètres individuellement pour certains composants.

1. Dans l'espace de travail Analytics, cliquez sur **Projects > Project default settings**.

---

**Remarque :** veillez à sélectionner le nom de projet correct dans le panneau d'état.

---

La boîte de dialogue Project Default Settings s'ouvre.

2. Sur la page Quantitative Processing, réalisez les opérations suivantes :
  - a. Sélectionnez un algorithme de ratio signal sur bruit depuis la liste **Signal to Noise Algorithm**.
  - b. Sélectionnez un algorithme d'intégration depuis la liste **Integration Algorithm** puis définissez les paramètres par défaut pour le traitement quantitatif.

Pour des descriptions des paramètres, consultez le document : *Système d'aide*.

3. Sur la page Qualitative Processing, sélectionnez un algorithme de recherche dans la bibliothèque à partir de la liste **Library Search Algorithm** puis définissez les paramètres par défaut pour le traitement quantitatif.

Pour des informations sur les algorithmes, consultez le document : *Système d'aide*.

4. Sur la page Mass Reconstruction Processing, sélectionnez un algorithme d'intégration à partir de la liste **Integration Algorithm** puis définissez les Intégration paramètres par défaut pour la reconstruction de masse.

Pour des descriptions des paramètres, consultez le document : *Système d'aide*.

---

**Remarque :** Seuls les algorithmes MQ4 et Summation sont disponibles.

---

5. Cliquez sur **Save**.
6. Cliquez sur **Close**.

## Utilisation des dispositions des espaces de travail

Utilisez la fonction de dispositions des espaces de travail pour enregistrer des dispositions d'espaces de travail personnalisées dans l'espace de travail Analytics. La disposition personnalisée est enregistrée avec le fichier de résultats et appliquée automatiquement lors de l'ouverture du fichier. Cela fait gagner du temps aux utilisateurs lorsqu'ils analysent les résultats. Une disposition d'espace de travail enregistrée peut être appliquée à d'autres fichiers de résultats. Elle peut également être définie comme disposition d'espace de travail par défaut pour un projet, appliquée à l'ouverture de tout fichier de résultats dans ce projet. Les dispositions des espaces de travail peuvent être enregistrées n'importe où, y compris sur des réseaux locaux.

Les utilisateurs peuvent alterner entre différentes dispositions enregistrées pour réaliser différents types d'analyses de données sur leurs fichiers de résultats.

---

**Remarque** : toutes les dispositions des espaces de travail sont enregistrées avec l'extension qlayout.

---

**Remarque** : aucun paramètre qui modifie directement les données n'est conservé dans une disposition d'espace de travail.

---

Le tableau suivant présente les éléments de l'interface utilisateur qui sont enregistrés avec les dispositions des espaces de travail.

**Tableau 6-3 : Éléments de l'interface utilisateur enregistrés avec les dispositions des espaces de travail**

Volet	Éléments de l'interface utilisateur enregistrés
Results Table	<ul style="list-style-type: none"> <li>• La case à cocher <b>Qualify for Rules Filters</b>.</li> <li>• Filtres de lignes de qualification.</li> <li>• Choix de tri de tableau.</li> <li>• Lignes et colonnes en surbrillance.</li> <li>• <b>Table display settings</b>.</li> <li>• Filtres de colonnes.</li> </ul> <hr/> <p><b>Remarque</b> : lors de l'application de la disposition d'espace de travail à un autre tableau de résultats, les paramètres de filtre de colonne sont appliqués, si possible. Si une colonne filtrée n'existe pas dans un Results Table, ou si une option de filtrage n'est pas applicable, le paramètre n'est pas appliqué.</p> <hr/>
Menu Views	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Le paramètre <b>Show hidden pane</b>.</li> <li>• Si l'option <b>Tabbed view</b> est sélectionnée.</li> </ul>

**Tableau 6-3 : Éléments de l'interface utilisateur enregistrés avec les dispositions des espaces de travail (suite)**

Volet	Éléments de l'interface utilisateur enregistrés
Samples ou Components and Groups	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si la liste Samples ou Components and Groups est ouverte.</li> <li>• Si des échantillons ou composants spécifiques sont sélectionnés pour apparaître dans un Results Table.</li> <li>• Dans la liste Samples, le paramètre pour <b>Options &gt; Synchronize Sample Selection</b>.</li> <li>• Dans la liste Components and Groups, sélection des options <b>All Internal Standards, All Analytes, All Components et Groups (where applicable)</b>.</li> <li>• Dans la liste Components and Groups, le paramètre pour <b>Options &gt; Show IS</b></li> </ul>
Peak Review	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le volet Peak Review est ouvert et s'il est ancré.</li> <li>• La <b>View</b> actuelle.</li> <li>• Toute <b>Options</b> sélectionnée, y compris les options Peak review display settings et l'option XIC Graph Title.</li> </ul>
Calibration Curve	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le volet Calibration Curve est ouvert.</li> <li>• Les paramètres <b>Show excluded standards, Show quality controls, Show legend, Use percent Y-axis et Log-log plot</b> dans le menu <b>Options</b>.</li> </ul>
Metric Plot	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le volet Metric Plot est ouvert.</li> <li>• Paramètres du menu <b>Link</b>.</li> <li>• Paramètres de la boîte de dialogue Regression.</li> <li>• Les paramètres <b>Display "N/A" as 0.0, Show sample names, Show legend, Use percent Y-axis, Start Y-axis at 0 et Connect with lines</b> dans le menu <b>Options</b>.</li> </ul>
Statistics Pane	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le volet Statistics est ouvert.</li> <li>• Sélections <b>Sample grouping</b> actives.</li> <li>• Sélections <b>Metric</b> actives.</li> </ul>

## Enregistrer la disposition actuelle de l'espace de travail

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Ouvrez un tableau de résultats.
3. Personnalisez la disposition de l'espace de travail selon les besoins.



4. Cliquez sur **Views > Save current layout**.  
La boîte de dialogue Save Workspace Layout As apparaît.
5. Saisissez un nom pour la disposition de l'espace de travail, puis cliquez sur **Save**.

## Appliquer une autre disposition de l'espace de travail au projet en cours

L'application d'autres dispositions des espaces de travail au fichier de résultats actuel permet de réaliser rapidement différents types d'analyses des résultats sur les mêmes données.

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Ouvrez un fichier de résultats.
3. Cliquez sur **Views > Apply different layout to current results**.  
La boîte de dialogue Apply a Workspace Layout apparaît.
4. Cliquez sur **Browse**, sélectionnez une disposition, puis cliquez sur **Open**.  
La boîte de dialogue Apply a Workspace Layout présente un aperçu de la disposition de l'espace de travail sélectionnée.
5. Cliquez sur **OK**.

---

**Conseil !** Appliquez les dispositions des espaces de travail utilisées récemment en cliquant sur **Views > Recent layouts** et en sélectionnant une disposition.

---

## Définir la disposition actuelle de l'espace de travail comme valeur par défaut du projet

La définition d'une disposition par défaut de l'espace de travail pour le projet permet de conserver une disposition partagée entre plusieurs utilisateurs ou pendant plusieurs sessions. Tout nouveau fichier de résultats créé dans le projet est alors ouvert avec la disposition de l'espace de travail par défaut du projet.

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Ouvrez un fichier de résultats.
3. Personnalisez la disposition de l'espace de travail pour l'adapter au projet.
4. Cliquez sur **Views > Set current layout as project default**.  
La boîte de dialogue Default Workspace Layout for the Project apparaît.
5. Dans le champ **Default layout name**, saisissez un nom pour la disposition, puis cliquez sur **OK**.
6. Cliquez sur **Results > Save**.

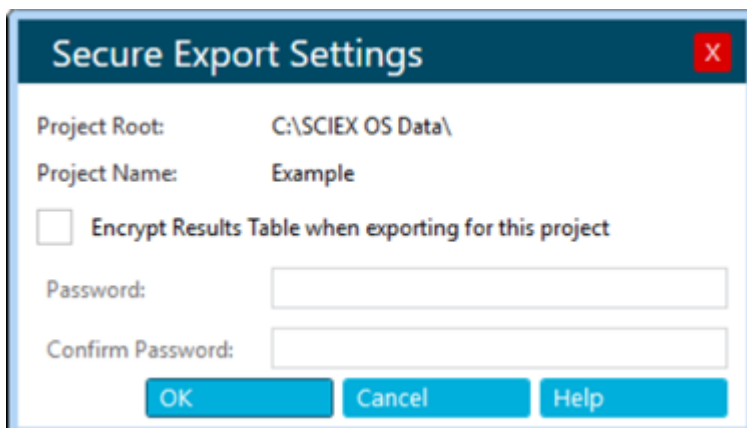
## Définir les paramètres d'exportation sécurisée du projet

Seul un utilisateur possédant le rôle d'administrateur peut exécuter cette tâche.

Si cette option est sélectionnée, les données du fichier texte sont alors cryptées au cours de l'exportation. Définir un mot de passe pour activer le cryptage.

1. Dans l'espace de travail Analytics, cliquez sur **Projects > Project secure export settings**.

**Illustration 6-22 : Boîte de dialogue Secure Export Settings**



2. Cochez la case **Encrypt Results Table when exporting for this project**.
3. Saisissez un mot de passe dans le champ **Password**.
4. Saisissez de nouveau le mot de passe dans le champ **Confirm Password**.
5. Cliquez sur **OK**.

## Activer l'avertissement de modification de pic du projet

Par défaut, cette option n'est pas sélectionnée. Lorsqu'elle est sélectionnée, si un utilisateur modifie un chromatogramme dans un tableau de résultats, puis enregistre les modifications, un message d'avertissement indique qu'un changement a été effectué. L'utilisateur a la possibilité de poursuivre l'enregistrement ou de retourner au tableau de résultats.

Dans l'espace de travail Analytics, cliquez sur **Projects > Enable project modified peak warning**.

## Création d'une méthode de traitement

Les méthodes de traitement contiennent des paramètres quantitatifs et qualitatifs pour le traitement des données. Le flux de travail non ciblé est utilisé pour les composants inconnus.

---

**Conseil !** Pour modifier une méthode de traitement existante, cliquez sur **Process Method > Open**.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Cliquez sur **Process Method > New**.

---

**Conseil !** Pour modifier une méthode de traitement pour le tableau de résultats actuel, cliquez sur **Process Method > Edit embedded method**, puis passez à l'étape 3.

---

3. Sur la page Workflow, sélectionnez au moins un flux de travail et les échantillons de référence. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le document : *Système d'aide*.

---

**Conseil !** Pour utiliser le flux de travail de reconstruction de masse, sélectionnez **Quantitation** uniquement.

---

4. Sélectionnez la page Components, puis effectuez les opérations suivantes :
  - a. Le cas échéant, sélectionnez le flux de travail de reconstruction de masse en cliquant sur **Options > Mass Reconstruction** puis sur **Yes** dans la boîte de dialogue de confirmation.
  - b. Complétez le tableau des composants. Vous trouverez des descriptions des champs du tableau dans le document : *Système d'aide*.

---

**Remarque :** Le flux de travail de reconstruction de masse est disponible uniquement lorsque l'algorithme d'intégration est défini sur **MQ4** ou **Summation**.

---

---

**Conseil !** Si un groupe est défini dans le tableau Components, l'utilisateur peut alors choisir d'ajouter les ions dans le groupe, même si l'ion précurseur et l'indice expérimental sont différents pour les transitions. Les ions ajoutés ne sont pas affichés dans le tableau, mais sur la page Integration et dans le tableau de résultats sous la mention **group name > Sum**. Cette fonction s'avère utile pour la quantification des protéines et des peptides.

---

---

**Conseil !** Si le temps de rétention des composants n'est pas connu, définissez le **Retention Time Mode** pour une masse ou une formule chimique sur **Find n peaks**, où *n* est 1, 2, 5, 10 ou tous. Le logiciel identifie le nombre spécifié de caractéristiques ayant la plus grande aire de pic, attribue le temps de rétention approprié, puis exécute un flux de travail de traitement de pic ciblé. Lorsque le traitement est terminé, la méthode intégrée pour le tableau de résultats peut être enregistrée comme méthode ciblée.

---

---

**Conseil !** Pour importer des composants ou des composants avec paramètres d'intégration depuis un fichier texte, utilisez la commande appropriée du menu **Import**. Si les informations sur le composant ne contiennent pas d'unités de concentration, le logiciel utilise les **Concentration units** définies dans la boîte de dialogue Project Default Settings.

---

---

**Remarque :** Il est impossible d'importer des paramètres d'intégration depuis des méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.

---

---

**Remarque :** Les paramètres d'intégration peuvent être importés depuis les méthodes de quantification du logiciel Analyst. Les paramètres du logiciel Analyst sont mappés vers les paramètres correspondants de SCIEX OS, et les paramètres par défaut du projet sont utilisés pour tout paramètre qui ne peut pas être mappé.

---

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

**Remarque :** Les paramètres d'intégration peuvent être importés à partir de méthodes logicielles de quantification MultiQuant n'utilisant pas l'algorithme SignalFinder. Pour les méthodes MQ4, la valeur de **S/N Integration Threshold** est modifiée de 0, la valeur par défaut dans le logiciel MultiQuant, à la valeur par défaut du projet. Les paramètres pour le logiciel MultiQuant sont mappés vers les paramètres correspondants pour SCIEX OS.

---

5. Sélectionnez la page Integration, puis réalisez les opérations suivantes :
- Sélectionnez les paramètres d'intégration pour chaque composant. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le document : *Système d'aide*.

**Conseil !** Pour définir les règles de la suppression automatique des données aberrantes, cliquez sur **Options > Remove Outliers Automatically**. Consultez le document : *Système d'aide*.

---

- (Facultatif) Pour afficher la région de bruit, cliquez sur **Options > Show Noise Regions**. Consulter la section : [Utilisation des régions de bruit](#).

**Remarque :** **Show Noise Regions** apparaît uniquement lorsque l'algorithme de ratio signal sur bruit est défini sur **Standard Deviation** ou **Peak to Peak**.

---

6. (Le cas échéant) Sélectionnez la page Library Search, puis définissez les paramètres de recherche de la bibliothèque. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le *système d'aide*.
7. Sélectionnez la page Calculated Columns, puis définissez toutes les formules personnalisées à utiliser dans des colonnes calculées personnalisées. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le *système d'aide*.

**Remarque :** Pour plus d'informations sur les colonnes calculées, consultez la section : [Colonnes calculées](#).

---

8. Sélectionnez la page Flagging Rules, puis sélectionnez les règles à utiliser pour marquer les résultats dans le tableau de résultats. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le document : *Système d'aide*.

En option, créez des règles de marquage personnalisées ou personnalisez les valeurs suivantes pour les règles prédéfinies :

- Critères d'acceptation pour les éléments suivants :
  - Précision des échantillons standard et de contrôle qualité
  - Plage de concentration calculée pour les échantillons inconnus
  - Intégration des pics
- Paramètres des voyants pour la précision de la masse, la confiance dans le temps de rétention, la correspondance d'isotopes, les scores de la bibliothèque et le score de Formula Finder
- Paramètres des voyants pour l'acceptation du ratio d'ions

Le ratio d'ions est le ratio de réponses du pic (l'aire ou l'amplitude du qualificateur et du quantificateur).

**Conseil !** Pour importer des règles de marquage depuis un fichier texte, cliquez sur **Import**.



---

9. Sélectionnez la page Formula Finder, puis sélectionnez les paramètres de Formula Finder. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le document : *Système d'aide*.
10. (Si le flux de travail non ciblé est sélectionné) Sélectionnez la page Non-targeted Peaks et définissez les paramètres de recherche non ciblée. Vous trouverez des descriptions des champs de cette page dans le document : *Système d'aide*.
11. Cliquez sur **Save**.

**Conseil !** Si une méthode non ciblée est créée, alors les paramètres par défaut du projet actuel sont utilisés pour l'intégration des pics. Ces paramètres sont enregistrés dans le fichier de la méthode de traitement. Si la méthode de traitement contient les analytes ciblés, les paramètres d'intégration personnalisés des composants ciblés n'affecteront pas l'intégration des pics non ciblés. Si l'utilisateur change ultérieurement le paramètre par défaut du projet, le paramètre modifié n'influera pas sur la méthode non ciblée existante qui contient encore les paramètres définis lors de la création de la méthode. Seule la méthode non ciblée nouvellement créée utilise les paramètres modifiés.

---

## Traiter des données

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Cliquez sur **Results > New**.
3. Dans la boîte de dialogue Process New Results, utilisez les flèches (  et  ) pour sélectionner les échantillons à traiter.
4. Sélectionnez une méthode de traitement de l'une des manières suivantes :
  - Cliquez sur **Browse** puis sélectionnez une méthode de traitement et cliquez sur **Open**.
  - Cliquez sur **New** puis créez la nouvelle méthode de traitement. Consulter la section : [Création d'une méthode de traitement](#).
5. (Facultatif) Cliquez sur **Edit** pour modifier la méthode de traitement. Consulter la section : [Création d'une méthode de traitement](#).
6. Sélectionnez un échantillon de comparaison pour les flux de travaux non ciblés.
7. Cliquez sur **Process**.



**Remarque :** Dans le cadre d'une analyse non ciblée, un groupement automatique par adduit est effectué. L'algorithme de groupement attribue des modificateurs d'adduit aux composés ayant le même temps de rétention si la différence entre leurs masses est associée à un adduit commun. Cette fonction permet d'éviter l'étude de composés dupliqués ayant des adduits de charge différents.

---

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

Si les données contiennent des colonnes de lots personnalisées portant le même nom que les colonnes prédéfinies du tableau de résultats ou que des formules existantes, un message d'avertissement apparaît. Cliquez sur **OK** pour continuer. Un caractère de soulignement (   ) est ajouté au début de ces noms de colonnes.

8. Pour afficher ou masquer les types d'échantillon, cliquez sur l'icône de filtre (  ) de la colonne **Sample Type**, puis sélectionnez ou désélectionnez les cases requises.
9. Pour définir les filtres d'acceptation, cliquez sur l'icône de filtre (  ) des colonnes d'acceptation souhaitées, sélectionnez **Filter by Flag**, puis sélectionnez **Pass** ou **Fail**.

---

**Remarque :** Les colonnes d'acceptation incluent **Accuracy**, **Accuracy Acceptance**, **Asymmetry Factor**, **Calculated Concentration**, **Concentration Acceptance**, **Integration Acceptance**, **Quality Retention Time Delta (min)**, **Retention Time Error (%)** et **Total Width**.


---

10. Pour sélectionner des filtres de confiance qualitatifs, cliquez sur le voyant **Confidence**, puis sélectionnez ou désélectionnez les cases requises.

---

**Remarque :** une fois le tableau de résultats généré à l'aide de l'algorithme AutoPeak, si l'utilisateur modifie la largeur XIC et le TR attendu, les données seront alors retraitées à l'aide de le modèle d'algorithme précédent, sauf si l'utilisateur met le modèle à jour en utilisant la nouvelle largeur XIC et les valeurs RT attendues.

---


11. Pour filtrer selon les valeurs individuelles d'une colonne du tableau de résultats, cliquez sur l'icône de filtre (  ) sur l'en-tête de colonne, puis cochez les cases pour les valeurs à afficher dans le tableau de résultats.

---

**Conseil !** Pour appliquer des filtres personnalisés supplémentaires, sélectionnez **Text Filters**.

---

---

**Conseil !** Pour réappliquer le filtre après avoir apporté une modification au tableau des résultats (par exemple, une modification du compte de zone), cliquez sur **Reapply Filter** (  ).

---




12. Enregistrez le fichier de résultats de l'une des manières suivantes :
  - Cliquez sur **Results > Save**.
  - Pour empêcher toute modification du tableau de résultats, cliquez sur **Results > Lock results file and save**.

## Ajouter des échantillons

### Conditions préalables

- Dans l'espace de travail Analytics, une fenêtre Results Table apparaît.

Cette option permet d'ajouter des échantillons supplémentaires à un tableau de résultats actuellement actif.

1. Cliquez sur **More > Add samples**.
2. Dans la boîte de dialogue Select Samples, sélectionnez les échantillons requis.
  - Le volet Available comprend les sous-dossiers, les fichiers wiff2 et les échantillons disponibles dans le dossier **Data** pour le projet actuel.
  - Développez des dossiers individuels pour afficher des sous-dossiers ou des fichiers wiff2. Si le fichier wiff2 est développé, il s'ouvre pour présenter les échantillons disponibles.
  - Utilisez les flèches pour ajouter (  ) ou supprimer (  ) des échantillons.
  - Sélectionnez des échantillons comme suit :
    - Double-cliquez sur un échantillon individuel.
    - Sélectionnez un échantillon ou un fichier de données puis cliquez sur  .
    - Faites glisser un échantillon ou un fichier de données du volet de gauche ou volet de droite.

Appuyez sur **Shift** ou sur **Ctrl** pour sélectionner plusieurs fichiers ou échantillons avant de les déplacer.
3. Cliquez sur **OK**.  
Une barre de progression apparaît pendant que les nouveaux échantillons sont intégrés et ajoutés au tableau existant.

## Personnaliser le tableau de résultats

### Conditions préalables

- Dans l'espace de travail Analytics, une fenêtre Results Table apparaît.

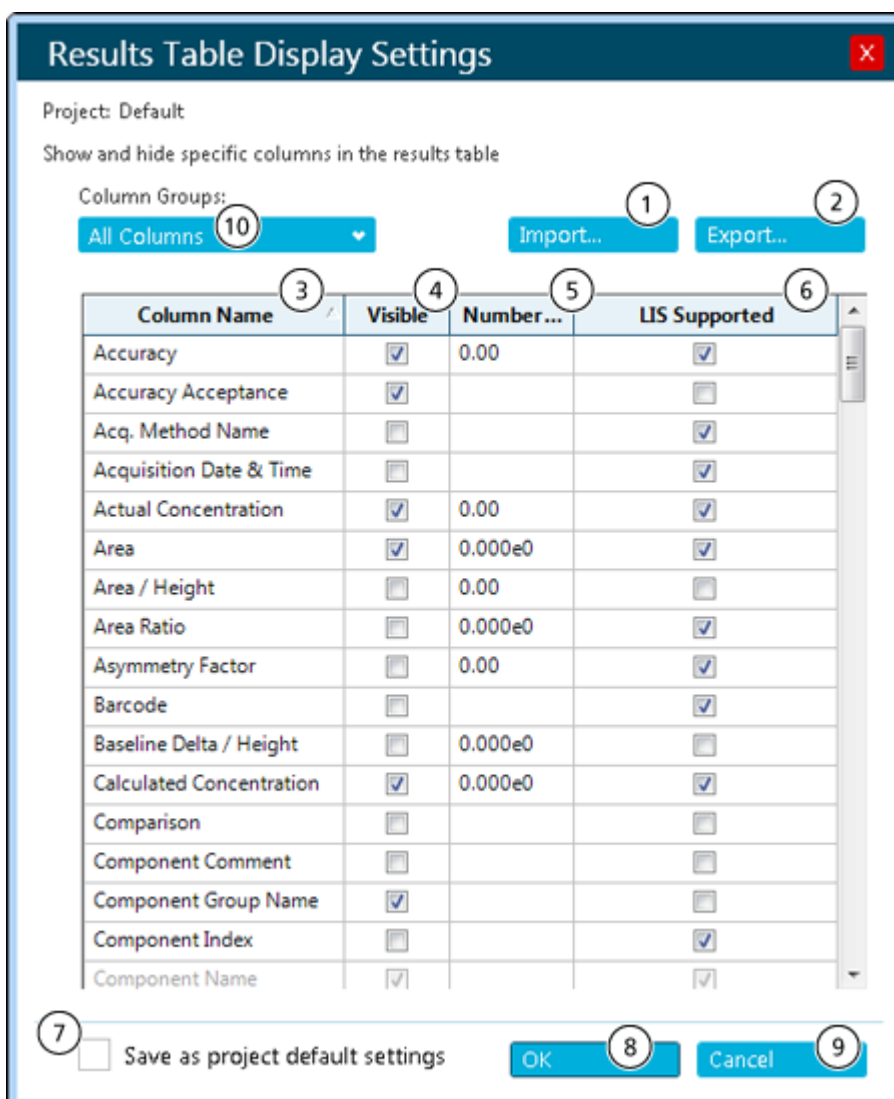
Sélectionnez le format numérique et les colonnes à afficher dans le tableau de résultats. Les paramètres de colonne peuvent être appliqués à tous les tableaux de résultats du projet.

**Remarque** : Certaines colonnes essentielles telles que **Sample Name**, **Sample ID**, **Barcode**, etc. ne doivent pas être masquées lorsque les utilisateurs personnalisent les paramètres des colonnes du tableau de résultats.

**Conseil !** Si les noms de colonne sont tronqués, placez le curseur sur le champ pour afficher le nom de la colonne dans une infobulle.

1. Cliquez sur **More > Table display settings**.  
La boîte de dialogue Results Table Display Settings apparaît. Vous trouverez une description des colonnes dans le tableau de résultats à la section : [Colonnes Results Table](#).

Illustration 6-23 : Boîte de dialogue Results Table Display Settings (Paramètres d'affichage du tableau de résultats)



Élément	Description
1	Cliquez ici pour sélectionner un fichier de paramètres de colonne préalablement enregistré à l'aide du bouton Export. Les champs de la boîte de dialogue sont mis à jour pour utiliser les informations provenant du fichier sélectionné.
2	Cliquez ici pour enregistrer les paramètres de la boîte de dialogue en cours dans un fichier. Utilisez le bouton Import pour importer et utiliser ces paramètres. Cette option permet à l'utilisateur de basculer entre différentes dispositions de colonnes.



Élément	Description
3	Noms des colonnes, apparaissant par ordre alphabétique. <b>Remarque :</b> Cette liste inclut également toutes les colonnes calculées définies dans la méthode de traitement utilisée pour créer le tableau de résultats.
4	Une coche indique que la colonne est visible.
5	Pour les champs numériques, utiliser le format 0.00 pour les notations non scientifiques et le format 0.00e0 pour les notations scientifiques. Modifier les points décimaux pour indiquer la précision des nombres présentés. Seul un point "." peut être utilisé comme séparateur décimal. <b>Remarque :</b> Le regroupement des nombres n'est pas pris en charge.
6	Les lignes pour lesquelles l'option <b>LIS Supported</b> est sélectionnée sont prédéfinies par le LIMS et les sélections de colonnes ne peuvent pas être modifiées.
7	Cliquez pour utiliser les paramètres de colonne pour les tableaux de résultats futurs.
8	Cliquez pour appliquer les modifications, puis fermez la boîte de dialogue.
9	Cliquez pour abandonner les modifications, puis fermez la boîte de dialogue.
10	Sélectionnez une catégorie de colonnes du tableau de résultats. Les utilisateurs peuvent filtrer les colonnes affichées dans le tableau de résultats en fonction de la sélection. Sélectionner une catégorie permet à l'utilisateur de trouver facilement une colonne dans le tableau de résultats.

2. Cochez ou décochez la case dans la colonne **Visible**, selon les besoins.

---

**Remarque :** En plus des colonnes décrites à la section : [Colonnes Results Table](#), le tableau de résultats peut contenir des colonnes de texte et calculées personnalisées. Les colonnes calculées sont identifiées par un astérisque.

---

3. (Facultatif) Dans la colonne **Number Format**, modifiez le format en optant pour entier ou notation scientifique.
4. (Facultatif) Dans la colonne **Number Format**, modifiez le nombre de décimales à afficher.
5. Cliquez sur **OK**.  
Les nouveaux paramètres sont appliqués au tableau de résultats. Les paramètres sont également enregistrés et appliqués lorsqu'un nouveau tableau de résultats est créé ou qu'un tableau de résultats enregistré précédemment est rouvert.

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

**Conseil !** Utilisez la ligne d'en-tête de la fenêtre Results Table pour modifier la largeur et l'ordre des colonnes. Faites glisser la bordure d'en-tête pour modifier la largeur. Faites glisser l'en-tête de colonne vers un autre emplacement dans le tableau de résultats pour modifier l'ordre des colonnes. Cliquez sur l'icône de filtre (▼) sur l'en-tête d'une colonne pour appliquer un filtre à la colonne. Lorsque le bouton **Export** est utilisé pour exporter un tableau de résultats, la largeur, l'ordre et les réglages de filtre de la colonne sont sauvegardés dans le fichier exporté.

---

## Créer un rapport

### Conditions préalables

- Dans l'espace de travail Analytics, une fenêtre Results Table apparaît.

---

**Conseil !** Pour sélectionner les analytes à inclure dans un rapport, utilisez la colonne **Reportable** du tableau de résultats. Consulter la section : [Colonnes Results Table](#).

---

1. Cliquez sur **Reporting > Create Report and Save Results Table**. La boîte de dialogue Create Report s'ouvre.
2. Sélectionnez un modèle dans la liste **Template name**.
3. Sélectionnez un format de rapport.
4. Pour modifier un nom de fichier et un emplacement, cliquez sur **Browse**, naviguez jusqu'à un autre emplacement, saisissez un **File name** puis cliquez sur **Save**.

---

**Remarque :** Par défaut, les rapports sont enregistrés dans  
ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter\Reports.

---

5. Cliquez sur la case **Create an individual report for each sample**, si nécessaire.
6. (Facultatif) Sélectionnez un logo différent pour le rapport :
  - a. Cliquez sur **Replace Logo**.
  - b. Utilisez les options de la boîte de dialogue Replace Logo pour modifier le logo le cas échéant.
  - c. Cliquez sur **Save**.
  - d. Cliquez sur **Cancel**.
7. Cliquez sur **View Pages** pour consulter la disposition du rapport.
8. Cliquez sur **Create**.

---

**Conseil !** Pour signaler les résultats sélectionnés à l'aide d'un modèle tels que Per Sample Quant, Per Sample Qual, Per Sample Visible Rows Using Visible Analytes ou Positive Hits Qual, utilisez des filtres ou masquez les lignes de votre choix dans le Results Table.

---

**Conseil !** Cliquez sur l'exemple dans **Template View** dans la boîte de dialogue Create Report pour afficher la disposition du modèle de rapport. Pour afficher un modèle spécifique, l'utilisateur doit disposer d'un fichier .jpg portant le même nom que le modèle, associé à un suffixe [Snapshot\_X], où X est le numéro de l'instantané dans la séquence. N'utilisez pas d'espaces entre le nom de fichier et le suffixe.

Par exemple, le modèle All Peaks Qual.docx serait nommé comme suit : All Peaks Qual[Snapshot\_1].jpg All Peaks Qual[Snapshot\_2].JPG All Peaks Qual[Snapshot\_3].jpg.

---

### Exporter et enregistrer un tableau de résultats

Conditions préalables
-----------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Dans l'espace de travail Analytics, une fenêtre Results Table apparaît.</li></ul> |
|---|
- 

**Conseil !** Pour sélectionner les analytes à exporter, utilisez la colonne **Reportable** du tableau de résultats. Consulter la section : [Colonnes Results Table](#).

---

1. Cliquez sur **Reporting > Export results > Export and save Results Table**.  
La boîte de dialogue Export s'ouvre.
2. Sélectionnez les options selon vos besoins.  
Pour des descriptions des options, consultez le document : *Système d'aide*.
3. Cliquez sur **OK**.

### Exporter le tableau de résultats - Métrique

Conditions préalables
-----------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Dans l'espace de travail Analytics, une fenêtre Results Table apparaît.</li></ul> |
|---|
- 

**Remarque :** Le fabricant décline toute responsabilité ou toute responsabilité éventuelle, y compris les dommages indirects ou consécutifs, résultant de l'exportation des données à partir de l'espace de travail Analytics.

---

L'exportation des tableaux de résultats est l'une des méthodes contrôlées d'extraction de données dans l'espace de travail Analytics.

Cette fonctionnalité permet de créer un texte délimité par des tabulations contenant les informations du tableau des résultats actif. Les informations sont exportées pour tous les échantillons et soit pour tous les composants, soit seulement pour les composants visibles pour la métrique ou le champ sélectionné.

1. Cliquez sur **Reporting > Export results > Results Table - Metric**.

La boîte de dialogue Export Metric (Exporter une valeur métrique) s'ouvre.

---

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

2. Sélectionnez la colonne à exporter dans le champ **Metric**, puis définissez les options. Consultez le document : *Système d'aide*.
3. Cliquez sur **OK**.

### Transfert des résultats vers un LIMS Watson

Conditions préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• Un tableau de résultats est ouvert et verrouillé.</li><li>• Le logiciel du LIMS Watson est ouvert.</li></ul>



---

**Remarque** : Un sous-ensemble des colonnes dans le tableau de résultats est transféré, y compris certaines colonnes masquées et certaines qui ne sont pas désignées comme **Reportable**.

---

1. Cliquez sur **Reporting > Initiate Transfer to Watson LIMS**. La boîte de dialogue de transfert apparaît.
2. Dans le logiciel du LIMS Watson, importez les données.
3. Dans la boîte de dialogue de transfert dans SCIEX OS, réalisez l'une des opérations suivantes :
  - Si le transfert a été réussi, cliquez sur **Confirm**.
  - Si le transfert n'a pas réussi, cliquez sur **Decline**.

### Transfert des résultats vers un autre LIMS

Procédures préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• Configurez le LIMS dans l'espace de travail Configuration. Consulter la section : <a href="#">Sélectionner les paramètres du LIMS (Laboratory Information Management System)</a>.</li><li>• Ouvrir un tableau de résultats verrouillé.</li></ul>



---

**Conseil** ! Pour sélectionner les analytes à exporter, utilisez la colonne **Reportable** du tableau de résultats. Consulter la section : [Colonnes Results Table](#).

---

1. Cliquez sur **Reporting > Transfer Results to LIMS**. La boîte de dialogue LIMS Transfer apparaît.
2. Sélectionnez un modèle dans la liste **Template**.
3. Cliquez sur **Transfer**.

### Utilisation des tableaux de résultats

Les tableaux de résultats résument la concentration calculée d'un analyte, ainsi que les résultats des analyses qualitatives, comme les correspondances dans la bibliothèque,

les résultats de Formula Finder, etc., dans chaque échantillon inconnu selon la courbe d'étalonnage. Les tableaux de résultats comprennent également les courbes d'étalonnage ainsi que les statistiques des résultats. L'utilisateur peut personnaliser le tableau de résultats et les afficher dans différentes présentations.

**Remarque :** Les colonnes du tableau de résultats marquées d'un astérisque (\*) sont des colonnes personnalisées de texte ou calculées.

Les données provenant d'un tableau de résultats peuvent être exportées vers un fichier .txt pour être utilisées dans d'autres applications comme Microsoft Excel. L'utilisateur peut exporter toutes les données du tableau de résultats ou juste les colonnes visibles.

**Conseil !** Si plusieurs sessions de tableaux de résultats ont été disposées verticalement ou horizontalement, cliquez sur **Views > Reset layout** pour rétablir la disposition d'origine des tableaux de résultats.

Utilisez le menu contextuel pour modifier les lignes du tableau de résultats. Pour afficher ce menu, cliquez sur le bouton droit de la souris n'importe où dans le tableau des résultats.

#### Illustration 6-24 : Menu contextuel

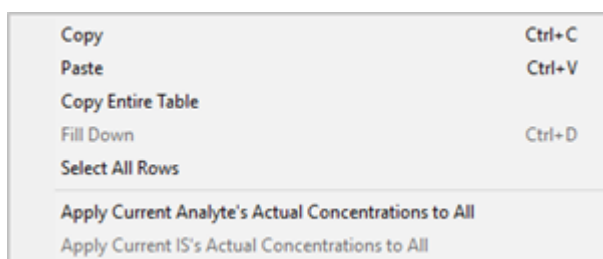


Tableau 6-4 : Commandes du menu contextuel

Libellé	Description
<b>Copy</b>	(Copier) Utilisez cette option pour copier les données actuelles dans le presse-papiers.
<b>Paste</b>	(Coller) Utilisez cette option pour coller les données du presse-papiers dans la vue actuelle.
<b>Copy Entire Table</b>	(Copier le tableau entier) Utilisez cette option pour copier l'ensemble du tableau dans le presse-papiers.
<b>Fill Down</b>	(Remplir vers le bas) (Composants) Utilisez cette option pour reproduire les informations figurant dans la première ligne sélectionnée vers toutes les lignes suivantes.
<b>Select All Rows</b>	(Sélectionner toutes les lignes) Utilisez cette option pour sélectionner toutes les lignes dans le tableau de résultats actuellement actif. Ceci est utile si l'utilisateur veut par la suite appliquer une commande, telle que <b>Copy</b> , qui agit sur les lignes sélectionnées.

Tableau 6-4 : Commandes du menu contextuel (suite)

Libellé	Description
<p><b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b></p>	<p>(Appliquer les concentrations réelles de l'analyte actuel à tous) (Analytes) S'il y a plusieurs analytes et que tous les analytes sont présents dans ces échantillons à la même concentration, utilisez cette option pour fournir un raccourci pour la définition du champ de concentration réelle pour tous les analytes pour les échantillons standard. Pour utiliser cette fonction :</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Utilisez la <b>Components and Groups List</b> pour afficher un seul analyte spécifique dans le tableau. Consulter la section : <a href="#">Liste des composants et des groupes</a>.</li> <li>2. (Facultatif) Filtrez la colonne <b>Sample Type</b> pour afficher uniquement les échantillons standard.</li> <li>3. Spécifiez la concentration réelle de l'analyte soit en la saisissant dans les cellules, soit en sélectionnant la colonne et en y copiant le texte.</li> <li>4. Sélectionnez <b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b>.</li> </ol> <p>Revenez à l'affichage de tous les composants et de tous les types d'échantillon, selon les besoins.</p>
<p><b>Apply Current IS's Actual Concentrations to All</b></p>	<p>(Appliquer les concentrations réelles des SI actuels à tous) (Standards internes) S'il y a plusieurs standards internes et que tous les standards internes sont présents dans ces échantillons à la même concentration, utilisez cette option pour fournir un raccourci pour la définition du champ de concentration réelle pour tous les standards internes pour les échantillons standard. Pour utiliser cette fonction :</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Utilisez la <b>Components and Groups List</b> pour afficher un seul standard interne dans le tableau. Consulter la section : <a href="#">Liste des composants et des groupes</a>.</li> <li>2. (Facultatif) Filtrez la colonne <b>Sample Type</b> pour afficher uniquement les échantillons standard.</li> <li>3. Spécifiez la concentration réelle du standard interne soit en la saisissant dans les cellules, soit en sélectionnant la colonne et en y copiant le texte.</li> <li>4. Sélectionnez <b>Apply Current IS's Actual Concentrations to All</b>.</li> </ol> <p>Revenez à l'affichage de tous les composants et de tous les types d'échantillon, selon les besoins.</p>

## Filtres du tableau de résultats

Utilisez les champs en haut du tableau de résultats pour afficher et filtrer le contenu.

Illustration 6-25 : Commandes de filtres



Tableau 6-5 : Filtres du tableau de résultats

Étiquette	Description
<b>x of y rows</b>	(x sur y lignes) Indique le nombre de lignes visibles (x) par rapport au nombre total de lignes (y).
<b>Filters</b>	(Filtres) Indique le nombre de colonnes auxquelles les filtres sont appliqués.
<b>Qualify for Rules Filters</b>	(Qualifier pour les filtres de règles) Bascule entre les deux affichages suivants pour le tableau de résultats : affichage des lignes qui correspondent aux filtres des critères d'acceptation ou de confiance, ou affichage des lignes qui n'y correspondent pas. Les critères d'acceptation et les voyants de confiance sont appliqués dans la méthode de traitement.
<b>Reapply Filter</b>	(Réappliquer le filtre) Permet de réappliquer le filtre après avoir apporté une modification au tableau de résultats (par exemple, une modification du compte de zone).  <b>Remarque :</b> Tous les filtres sont automatiquement réappliqués lorsqu'un autre filtre est ajouté ou modifié.
<b>Clear</b>	(Effacer) Efface tous les filtres.

## Colonnes Results Table

### Remarque :

- Les colonnes avec un astérisque (\*) sont des colonnes de texte personnalisées, des colonnes calculées ou des colonnes créées en raison d'une règle de marquage combinée.
- Les colonnes dont le nom commence par un caractère de soulignement (\_) sont des colonnes de lots personnalisés qui ont le même nom qu'une formule ou colonnes du tableau des résultats prédéfinie.
- La colonne **Format** indique comment le champ est validé dans les formules.
- Dans les colonnes contenant des nombres, les utilisateurs peuvent modifier le format des nombres et le nombre de chiffres significatifs. Choisissez entre **Decimal**, **Significant Digits** et **Scientific Notation** dans la colonne **Number Format** puis saisissez le nombre de chiffres significatifs dans la colonne **Number Format Precision** de la boîte de dialogue Results Table Display Settings.

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Accuracy</b>	(Précision) Affiche la précision des standards et des échantillons de contrôle qualité (CQ). Pour les autres types d'échantillon, la valeur est définie sur <b>N/A</b> .  Pour des étalons de concentration connue, la précision des étalons et des échantillons CQ est définie comme $100 \% \times (\text{Calculated Concentration}) / (\text{Actual Concentration})$ .	Nombre	O
<b>Accuracy Acceptance</b>	(Acceptation de la précision) Affiche le statut d'acceptation de la précision.	Text	N
<b>Acq. Method Name</b>	(Nom de la méthode d'acquisition) Affiche le nom de la méthode d'acquisition utilisée pour acquérir l'échantillon.	Text	O
<b>Acquisition Date &amp; Time</b>	(Date et heure d'acquisition) Affiche la date et l'heure auxquelles l'échantillon a été acquis.	Text	O
<b>Actual Concentration</b>	(Concentration réelle) Pour les étalons et les échantillons CQ, affiche la concentration connue attendue.	Nombre	O



Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Adduct/ Charge</b>	(Adduit/Charge) Indique l'adduit ou l'état de charge du composé. Dans le flux de travail ciblé, cette valeur est définie par l'utilisateur. Dans le flux de travail non ciblé, cette valeur est automatiquement définie par le logiciel si le groupement par adduit est activé.	Text	N
<b>Area</b>	(Aire) Affiche l'aire de pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, cette valeur est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	O
<b>Area / Height</b>	(Aire/Amplitude) Affiche l'aire de pic détectée divisée par l'amplitude. Si aucun pic n'a été détecté, cette valeur est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>Area Ratio</b>	(Ratio d'aire) Pour les analytes qui utilisent un standard interne, affiche le ratio de l'analyte <b>Area</b> sur l' <b>IS Area</b> . Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	O
<b>Area Ratio of comparison</b>	<p>(Ratio d'aire de comparaison) Affiche le ratio d'aire de l'échantillon/échantillon de contrôle.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Si aucun pic n'a été trouvé dans le contrôle, la valeur est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).</li> <li>• Si aucun pic n'a été trouvé dans l'échantillon, la valeur est alors définie sur 0.</li> <li>• Si chaque pic de l'échantillon est inférieur au <b>Area Ratio Threshold</b>, la valeur est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).</li> <li>• Si aucun échantillon de comparaison n'est utilisé, la valeur est alors définie sur <b>No control sample</b> (Pas d'échantillon de contrôle).</li> <li>• Pour l'échantillon de contrôle, le ratio d'aire des pics trouvés est toujours 1.</li> </ul> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Asymmetry Factor</b>	(Facteur d'asymétrie) Affiche la distance séparant la ligne centrale du pic de la pente arrière, divisée par la distance séparant la ligne centrale du pic de la pente avant, toutes les mesures étant effectuées à 10 % de l'amplitude maximum du pic.	Nombre	O
<b>AutoPeak Asymmetry</b>	(Asymétrie AutoPeak) Indique le ratio de l'asymétrie du pic intégré par rapport à la symétrie attendue d'après le modèle. Un ratio de 1 indique une correspondance adéquate. Si la valeur n'est pas de 1, la source d'ions peut être saturée ou l'intégration incorrecte.  Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.	Nombre	N
<b>AutoPeak Candidate Model Quality</b>	(Qualité du modèle candidat AutoPeak) Indique l'adéquation du pic à utiliser pour la création d'un modèle de pic. Si la valeur est considérablement supérieure à 1, cela signifie que l'échantillon utilisé pour créer la méthode de quantification ne convient pas. Utilisez un pic ayant une réponse plus grande pour créer le modèle, puis appliquez ce pic à tous les échantillons.  Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.	Nombre	N
<b>AutoPeak Group Confidence</b>	(Confiance du groupe AutoPeak) Montre la probabilité qu'un groupe de pics réels soit intégré et que l'intégration n'inclue pas de pic de bruit faux positif.  Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.	Nombre	N

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>AutoPeak Integration Quality</b>	<p>(Qualité d'intégration AutoPeak) Indique la qualité des données. La qualité est représentée par une valeur comprise entre 0 et 1. Si la qualité est inférieure à 0,6, approfondissez l'analyse de l'intégration.</p> <p>Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.</p>	Nombre	N
<b>AutoPeak Model Source</b>	<p>(Source de modèle AutoPeak) Affiche les noms des échantillons et des composants utilisés pour la modélisation de pic. Si le composant utilisé pour la modélisation n'est pas le même que celui qui a été intégré, réviser le modèle pour déterminer s'il est approprié.</p> <p>Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.</p>	Nombre	N
<b>AutoPeak Num Peaks</b>	<p>(Nombre de pics AutoPeak) Affiche le nombre de pics adjacents complexes détectés par l'algorithme.</p> <p>Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.</p>	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>AutoPeak Peak Width Confidence</b>	<p>(Confiance de largeur de pic AutoPeak) Affiche le niveau de confiance dans la largeur de pic. Une valeur de 1 indique que la largeur de pic réelle est égale à la largeur de pic attendue. Une valeur supérieure à 1 indique que la largeur de pic réelle est supérieure à la largeur de pic attendue. Une valeur inférieure à 1 indique que la largeur de pic réelle est inférieure à la largeur de pic attendue, ou que le pic est plus large en raison d'un changement des conditions chromatographiques.</p> <p>Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.</p>	Nombre	N
<b>AutoPeak Saturated acc</b>	<p>(AutoPeak saturé) Si l'option <b>Saturation correction</b> a été utilisée et que le pic correspondant était saturé (de sorte que le modèle ajusté s'étend au-dessus du pic), ce champ indique <b>Yes</b> (Yes). Sinon, la colonne est vide. Si la précision et le %CV des échantillons plus fortement concentrés ne se situent pas dans les plages acceptables, ajustez la <b>Saturation correction</b>.</p> <p>Applicable uniquement aux méthodes de traitement qui utilisent l'algorithme d'intégration AutoPeak.</p>	Text	N
<b>Barcode</b>	<p>(Code-barres) Affiche l'ID unique pour un échantillon. L'ID unique est initialisé à partir de la valeur initialement spécifiée dans le lot utilisé pour acquérir les données.</p> <p>Le <b>Barcode</b> peut contenir jusqu'à 20 caractères. Le <b>Barcode</b> ne peut pas contenir l'un des caractères non valides suivants : \ / : * ? " &lt; &gt;   = ou les caractères 0 à 31 extraits du tableau ASCII.</p>	Text	O

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Baseline Delta/ Height</b>	(Delta référence / amplitude) Affiche la valeur absolue de la différence entre l'amplitude de la référence, au début du pic et à la fin du pic, par rapport à la hauteur réelle du pic. Les valeurs supérieures à 0,1 indiquent que la référence n'a peut-être pas été intégrée correctement et que le pic doit être examiné.	Nombre	N
<b>Calculated Concentration</b>	(Concentration calculée) Pour des étalons de concentration connue, affiche la valeur de la concentration rétrocalculée à partir de la courbe d'étalonnage. Les équations de régression décrivent la manière dont la régression est effectuée pour les différents types de régression et la pondération.	Nombre	O
<b>Combined Score</b>	(Score combiné) (Facultatif) Affiche un seul score numérique qui peut être utilisé à des fins de comparaison relative.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	N
<b>Comparison</b>	(Comparaison) Affiche les composants de l'échantillon de comparaison.	Nombre	N
<b>Component Comment</b>	(Commentaire du composant) Affiche un commentaire arbitraire pour l'analyte ou le standard interne applicable à l'ensemble des échantillons.	Text	N
<b>Component Group Name</b>	(Nom du groupe de composants) Affiche tout nom de groupe associé à l'analyte ou au standard interne.	Text	N
<b>Component Index</b>	(Indice du composant) Affiche l'index de l'analyte ou du standard interne dans la méthode de traitement d'origine.	Nombre	O

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Component Name</b>	<p>(Nom du composant) Affiche le nom de l'analyte ou du standard interne.</p> <p>Cette colonne est toujours visible dans le tableau de résultats. Dans la boîte de dialogue Column Settings, la case à cocher n'est pas disponible.</p> <p>Le <b>Component Name</b> peut contenir jusqu'à 50 caractères.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Le <b>Component Name</b> ne peut être modifié que dans la méthode de traitement, et non dans le tableau de résultats.</li> <li>Cette colonne est obligatoire pour un transfert LIMS (Laboratory Information Management System).</li> </ul>	Text	O
<b>Component Type</b>	(Type de composant) Indique le type d'analyte : <b>Quantifier</b> , <b>Qualifier</b> ou <b>Internal Standard</b> .	Text	N
<b>Conc. Units</b>	(Unités de concentration) Affiche les unités de concentration.	Text	O
<b>Concentration Acceptance</b>	(Acceptation de la concentration) Affiche le statut d'acceptation de la concentration calculée.	Nombre	N
<b>Concentration Ratio</b>	(Ratio de concentration) Pour les analytes qui utilisent un standard interne, affiche le ratio de l' <b>Actual Concentration</b> sur l' <b>IS Actual Concentration</b> . Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>Difference from Average Sample Time</b>	(Différence par rapport à la durée moyenne des échantillons) Indique la différence entre la durée d'analyse pour cet échantillon et la durée d'analyse moyenne pour tous les échantillons.	Nombre	N

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Dilution Factor</b>	(Facteur de dilution) Affiche le facteur selon lequel l'échantillon a été dilué. Ce facteur est utilisé dans le calcul de la courbe d'étalonnage.	Nombre	O
<b>End Time</b>	(Temps de fin) Affiche le temps de rétention de fin du pic détecté en minutes.	Nombre	O
<b>End Time at 10%</b>	(Temps de fin à 10 %) Affiche le temps en minutes le long de la partie arrière du pic où l'intensité est à 10 % de l'amplitude du pic.	Nombre	N
<b>End Time at 5%</b>	(Temps de fin à 5%) Affiche le temps en minutes le long de la partie arrière du pic où l'intensité est à 5% de l'amplitude du pic.	Nombre	N
<b>Expected Ion Ratio</b>	<p>(Ratio d'ions attendu) Affiche le ratio d'ions attendu pour les échantillons inconnus, CQ et standard.</p> <p>Pour chaque composant dans un groupe, le <b>Expected Ion Ratio</b> est la moyenne des ratios d'ions de ses standards. Un standard n'est pas inclus dans le calcul du <b>Expected Ion Ratio</b> du composant si les conditions suivantes s'appliquent :</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. L'aire de pic est N/A.</li> <li>2. La colonne Utiliser n'est pas sélectionnée.</li> </ol>	Nombre	O
<b>Expected RT</b>	(TR attendu) Affiche le temps de rétention prévu d'origine à partir de la méthode de traitement en minutes.	Nombre	O
<b>Expected MW</b>	<p>(Poids moléculaire attendu) Affiche le poids prévu d'origine à partir de la méthode de traitement en Da.</p> <p>Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.</p>	Nombre	O

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Formula</b>	(Formule) (Facultatif) Affiche une formule chimique valide. Si la formule chimique n'est pas valide, elle n'est pas conservée par le logiciel. Si la formule chimique est valide, les colonnes <b>Mass (Da)</b> et <b>Isotope</b> sont renseignées automatiquement.	Text	O
<b>Formula Confidence</b>	(Confiance formule) Affiche le niveau de confiance en pourcentage dans le <b>Formula Finder Score</b> . Il est calculé sur la base de : <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dans quelle mesure le spectre MS actuel correspond au spectre théorique pour le composé, en fonction de la masse.</li> <li>• Dans quelle mesure le spectre MS/MS acquis correspond au spectre MS/MS présent dans la base de données du logiciel LibraryView.</li> </ul> <p>Le score de spectre MS a une pondération deux fois plus élevée que celle du score de spectre MS/MS.</p> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Text	N
<b>Formula Finder</b>	(Formula Finder) Affiche le seul score numérique qui peut être utilisé à des fins de comparaison relative. La valeur peut être mise à jour en utilisant les données du tableau de résultats de Formula Finder de l'examen des pics. <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Nombre	N
<b>Formula Finder Results</b>	(Résultats de Formula Finder) (Facultatif) Affiche la meilleure correspondance des résultats de Formula Finder. <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Text	N



Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Formula Finder Score</b>	(Score Formula Finder) (Facultatif) Affiche un seul score numérique qui peut être utilisé à des fins de comparaison relative.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Found at Fragment</b>	(Présent sur fragment) (Facultatif) Affiche la meilleure masse de fragment (Da) demandée à laquelle les spectres correspondants ont été trouvés.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Found at Mass</b>	(Présent sur masse) (Facultatif) Affiche la meilleure masse d'extraction (Da) demandée à laquelle les spectres correspondants ont été trouvés.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Fragment Mass</b>	(Masse de fragment) (Facultatif) Affiche la masse de fragment spécifiée dans la méthode. Le précurseur du fragment est extrait à partir de la MS/MS dans la colonne <b>Extraction Mass (Da)</b> . Lorsqu'elle est fournie, cette valeur doit être numérique.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Fragment Mass Error (ppm)</b>	(Erreur de masse de fragment (ppm)) (Facultatif) Affiche la différence entre le Found at Fragment et la Fragment Mass en ppm.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Fragment Mass Error (mDa)</b>	(Erreur de masse de fragment (mDa)) (Facultatif) Affiche la différence entre le Found at Fragment et la Fragment Mass en mDa.	Nombre	<input type="radio"/>
<b>Fragment Mass Error Confidence</b>	(Confiance dans l'erreur de masse de fragment) (Facultatif) Affiche le niveau de confiance dans l'erreur de masse de fragment.	Text	<input type="radio"/>
<b>Height</b>	(Amplitude) Affiche l'amplitude du pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, cette valeur est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	<input type="radio"/>

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Height Ratio</b>	(Ratio d'amplitude) Pour les analytes qui utilisent un standard interne, affiche le ratio de l' <b>Height</b> sur l' <b>IS Height</b> . Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	O
<b>Index</b>	(Index) Affiche l'index de la ligne dans l'ordre d'origine non trié. Si le tableau est trié en fonction d'une autre colonne, il est possible de le ramener à l'ordre d'origine en effectuant un tri sur cette colonne.	Nombre	N
<b>Injection Volume</b>	(Volume d'injection) Affiche le volume de l'échantillon stocké dans la méthode et injecté par l'auto-échantillonneur.	Nombre	O
<b>Integration Acceptance</b>	(Acceptation de l'intégration) Indique dans quelle mesure l'intégration des pics respecte les critères d'acceptation. Il est calculé sur la base de ces facteurs, selon la configuration des règles de marquage : <ul style="list-style-type: none"> <li>• Qualité d'intégration</li> <li>• Facteur d'asymétrie</li> <li>• Largeur de pic totale, en minutes</li> <li>• Erreur de durée de rétention, mesurée en pourcentage ou en minutes</li> </ul>	Nombre	N
<b>Integration Type</b>	(Type d'intégration) Indique le type d'intégration. <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Baseline</b> : un pic autonome qui a été intégré de la manière habituelle.</li> <li>• <b>Valley</b> : indique qu'il existait deux pics adjacents et que le signal n'est pas revenu à la valeur de référence entre les deux.</li> <li>• <b>N/A</b> (N/A) : indique qu'un pic n'a pas été détecté.</li> <li>• <b>Manual</b> : indique que le pic a été intégré manuellement.</li> </ul>	Text	O

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Ion Ratio</b>	<p>(Ratio d'ions) Indique le ratio d'ions. Les ratios d'ions sont déterminés quand au minimum deux transitions MRM à partir d'un seul analyte ont été rassemblées dans un groupe.</p> <p>Tous les analytes d'un groupe constituent le sous-groupe des analytes. Tous les standards internes d'un groupe constituent le sous-groupe des standards internes. Le premier composant d'un sous-groupe est utilisé en tant qu'ion quantificateur. Le reste des composants du sous-groupe est utilisé en tant qu'ions qualificateurs.</p> <p><i>Ratio d'ions = (aire ou amplitude de pic du qualificateur)/(aire ou amplitude de pic du quantificateur)</i></p> <p>Le ratio d'ions peut être calculé pour l'aire de pic ou pour la hauteur de pic. Si la méthode de traitement utilise l'aire pour la partie régression du premier composant (le composant dont l'indice est 1) dans le tableau de résultats, l'aire du pic est alors utilisée pour le calcul du ratio d'ions pour le tableau de résultats entier. Si l'amplitude est utilisée pour la régression du premier composant, la hauteur du pic est utilisée pour le calcul.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Si un composant n'est pas membre d'un groupe, la valeur <b>Ion Ratio</b> est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).</li> <li>• Si aucun pic n'est trouvé, la valeur <b>Ion Ratio</b> est alors définie sur <b>N/A</b> (N/A).</li> <li>• Si le ratio d'ions est appliqué à tous les composants dans les deux sous-groupes d'analytes et de standards internes, le qualificateur est le quantificateur.</li> <li>• Si l'intégration change pour les pics du quantificateur ou du qualificateur, le ratio d'ions est recalculé.</li> </ul>	Nombre	○

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
	<p><b>Remarque</b> : L'utilisateur peut définir des règles de marquage pour le ratio d'ions dans la méthode de traitement.</p>		
<b>Ion Ratio Acceptance</b>	(Acceptation du ratio d'ions) Affiche le statut d'acceptation du ratio d'ions.	Nombre	N
<b>Ion Ratio Confidence</b>	(Confiance dans le ratio d'ions) Affiche le niveau de confiance dans le ratio d'ions.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Text	N
<b>IS</b>	(Standard interne) Indique si la ligne est un standard interne ou pas. Une case cochée indique que le composant de la ligne est un standard interne, et non un analyte.  <b>Remarque</b> : La case <b>IS</b> est cochée automatiquement pour les noms d'échantillons contenant .heavy ou -cis, car ces échantillons sont définis comme standards internes dans les flux de travail protéomiques. Pour les autres flux de travail, ce ne sont pas des standards internes. La case <b>IS</b> devrait donc être décochée.	Nombre	N
<b>IS Actual Concentration</b>	(Concentration réelle SI) Affiche la concentration réelle du standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Area</b>	(Aire SI) Affiche l'aire pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>IS Area / Height</b>	(Aire / Amplitude SI) Affiche le ratio de l' <b>IS Area</b> par rapport à l' <b>IS Height</b> du standard interne associé à l'analyte en cours. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Baseline Delta / Height</b>	(Delta référence / amplitude SI) Affiche la valeur absolue de la différence d'amplitude entre la référence, au début du pic et à la fin du pic, et la hauteur réelle du pic pour le standard interne. Les valeurs supérieures à 0,1 indiquent que la référence n'a peut-être pas été intégrée correctement et que le pic doit être examiné.	Nombre	N
<b>IS Comment</b>	(Commentaire SI) Affiche un commentaire arbitraire relatif au standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Text	N
<b>IS End Time</b>	(Temps de fin SI) Affiche le moment où l'acquisition est terminée pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Expected MW</b>	(Poids moléculaire attendu SI) Affiche le poids moléculaire attendu pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).  Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.	Nombre	O
<b>IS Expected RT</b>	(Temps de rétention attendu SI) Affiche le temps de rétention attendu pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>IS Height</b>	(Hauteur SI) Affiche la hauteur pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Integration Type</b>	(Type d'intégration SI) Affiche le type d'intégration pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Text	N
<b>IS Mass Info</b>	(Info masse SI) Affiche les informations sur la masse pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Text	N
<b>IS MW</b>	(Poids moléculaire SI) Affiche le poids moléculaire trouvé pour le standard interne associé à l'analyte actuel, en Da. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).  Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.	Nombre	N
<b>IS MW Delta (Da)</b>	(Delta PM SI (Da)) Affiche la différence entre le poids moléculaire attendu et trouvé pour le standard interne, en Da.  Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.	Nombre	O
<b>IS MW Delta (ppm)</b>	(Delta PM SI (ppm)) Affiche la différence entre le poids moléculaire attendu et trouvé pour le standard interne, en ppm.  Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.	Nombre	O

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>IS Name</b>	(Nom SI) Affiche le nom du standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Text	N
<b>IS Peak Comment</b>	(Commentaire pic SI) Affiche le commentaire relatif au pic pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Text	N
<b>IS Quality</b>	(Qualité SI) Affiche la qualité du standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Region Height</b>	(Hauteur région SI) Affiche la hauteur pour la région du standard interne. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Retention Time</b>	(Temps de rétention SI) Affiche le temps de rétention pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Signal / Noise</b>	(Signal / Bruit SI) Affiche le rapport signal/bruit pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Start Time</b>	(Temps de début SI) Affiche le temps de début pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>IS Total Width</b>	(Largeur totale SI) Affiche la largeur totale pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>IS Width at 50%</b>	(Largeur SI à 50 %) Affiche la largeur à 50 % pour le standard interne associé à l'analyte actuel. Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N
<b>Isotope Confidence</b>	(Confiance isotope) Affiche le niveau de confiance dans le ratio isotopique.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Text	N
<b>Isotope Ratio Difference</b>	(Ratio isotope) Identifie la différence entre le motif isotopique théorique (basé sur la formule) et le motif isotopique à partir des spectres acquis.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	N
<b>LC Method</b>	(Méthode LC) Affiche le nom de la méthode LC utilisée pour acquérir les données.	Text	N
<b>Library Confidence</b>	(Confiance bibliothèque) Indique le niveau de confiance dans le <b>Library Hit</b> selon le <b>Library Score</b> du résultat.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Text	N



Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Library Hit</b>	<p>(Résultat bibliothèque) Affiche le nom du composé de la meilleure correspondance de la bibliothèque, c'est-à-dire le composé avec le score de pureté le plus élevé et la formule correspondant à la formule demandée.</p> <p>La valeur peut être mise à jour en utilisant les données de la grille de résultats de la recherche dans la bibliothèque d'examen des pics. Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Text	N
<b>Library Score</b>	<p>(Score bibliothèque) Indique le niveau d'adéquation de la correspondance de la bibliothèque par rapport à la masse trouvée.</p> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Nombre	N
<b>Mass Error (ppm)</b>	<p>(Erreur de masse (ppm)) Affiche la différence entre la masse trouvée et la masse d'extraction, exprimée en parties par million.</p> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Nombre	N
<b>Mass Error (mDa)</b>	<p>(Erreur de masse (mDa)) Affiche la différence entre la masse trouvée et la masse d'extraction, exprimée en millidaltons.</p> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Nombre	N
<b>Mass Error Confidence</b>	<p>(Confiance dans l'erreur de masse) Affiche le niveau de confiance dans l'erreur de masse.</p> <p>Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.</p>	Text	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Mass Info</b>	<p>(Info masse) Affiche les informations de masse associées au composant.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Pour les expériences MRM, il s'agit de Q1/Q3 et pour les profils, ou analyse complète, il s'agit de Start – Stop.</li> <li>• Pour les expériences UV, ADC ou DAD, il s'agit de la longueur d'onde (DAD) ou des informations de canaux (UV/ADC).</li> </ul> <p>Si la masse de fragment existe, elle sera utilisée pour l'extraction XIC.</p> <p>S'il n'y a pas de masse de fragment, la masse du précurseur doit alors être utilisée pour l'extraction XIC.</p>	Text	O
<b>Modified</b>	<p>(Modifié) Indique si les paramètres de détection de pic ont été modifiés. Une case cochée indique que les paramètres de détection de pic dans la méthode de traitement ont été modifiés à l'aide du volet Peak Review.</p>	Nombre	O
<b>MS Method</b>	<p>(Méthode MS) Affiche le nom de la méthode MS utilisée pour acquérir les données.</p>	Text	N
<b>MW</b>	<p>(PM) Affiche le poids moléculaire trouvé de l'analyte, à partir du graphique reconstruit, en Da.</p> <p>Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.</p>	Nombre	O
<b>MW Delta (Da)</b>	<p>(Delta PM (Da)) Affiche la différence entre le poids moléculaire attendu et trouvé, en Da.</p> <p>Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.</p>	Nombre	O

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>MW Delta (ppm)</b>	(Delta PM (ppm)) Affiche la différence entre le poids moléculaire attendu et trouvé, en ppm.  Applicable aux flux de travail de reconstruction de masse uniquement.	Nombre	O
<b>Non-Targeted Peak</b>	(Pic non ciblé) Indique si le pic a été trouvé par le détecteur de pics amélioré.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	N
<b>Operator Name</b>	(Nom de l'opérateur) Affiche le nom de l'opérateur de l'instrument qui a acquis l'échantillon.	Text	O
<b>Original Filename</b>	(Nom du fichier d'origine) Affiche le nom du fichier.	Text	O

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Outlier Reasons</b>	<p>(Motifs des données aberrantes) Lorsque la suppression des données aberrantes a été activée dans la méthode de quantification, indique quel critère a été trouvé en dehors des limites prédéterminées pour le composant.</p> <p>La colonne <b>Outlier Reasons</b> est associée aux règles de suppression automatique des données aberrantes dans la méthode de quantification. Il s'agit d'une colonne prédéfinie dans le tableau de résultats.</p> <p>Motif du marquage de la donnée aberrante :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Accuracy</li> <li>• Concentration</li> <li>• Ratio d'ions</li> </ul> <p>S'il existe un pic pour le quantificateur ou pour le qualificateur, mais pas pour les deux, le ratio d'ions est alors marqué pour les deux composants. Si aucun de ces composants ne présente de pic, le ratio d'ions n'est marqué pour aucun des composants.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Impossible de calculer le ratio d'ions attendu</li> <li>• Une règle de marquage personnalisée créée par l'utilisateur a échoué</li> </ul>	Text	N
<b>Peak Comment</b>	(Commentaire pic) Affiche un commentaire arbitraire concernant la ligne.	Text	N
<b>Plate Number</b>	(Numéro de plaque) Affiche le numéro de plaque de l'auto-échantillonneur utilisé pour acquérir les données, comme indiqué dans l'éditeur de lots.	Text	O
<b>Points Across Baseline</b>	(Points sur la référence) Affiche le nombre d'analyses effectuées le long du pic.	Nombre	N

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Points Across Half Height</b>	(Points sur la moitié de l'amplitude) Affiche le nombre d'analyses effectuées le long du pic à 50 % environ de l'amplitude.	Nombre	N
<b>Polarity</b>	(Polarité) Affiche la polarité de l'expérience utilisée pour acquérir l'échantillon.	Text	N
<b>Precursor Mass</b>	(Masse du précurseur) Indique les paramètres d'entrée de traitement provenant de la méthode de traitement.  Cette colonne est toujours visible dans le tableau de résultats. Dans la boîte de dialogue Column Settings, la case à cocher n'est pas disponible.	Nombre	N
<b>Proc. Method Name</b>	(Nom de la méthode de traitement) Affiche le nom de la méthode de traitement utilisée pour créer le tableau de résultats.	Text	O
<b>Quality</b>	(Qualité) Indique la qualité du pic intégré. La zone du pic intégré et la zone d'une fenêtre RT plus large sont comparées. Une valeur de zéro indique que le pic s'est mal intégré, ou qu'aucun pic n'est présent. Une valeur de 1,0 indique un pic bien intégré qui a besoin d'être examiné.	Nombre	N
<b>Rack Number</b>	(Numéro de carrousel) Affiche le numéro de carrousel de l'auto-échantillonneur utilisé pour acquérir les données, comme indiqué dans l'éditeur de lots.	Text	O
<b>Region Height</b>	(Amplitude région) Affiche l'amplitude de pic du plus grand pic à proximité du pic détecté. Cela est utile conjointement avec le champ <b>Quality</b> . Les pics de basse qualité qui ont également une <b>Region Height</b> raisonnable doivent être examinés. Si la <b>Region Height</b> est faible, aucun pic significatif n'est présent.	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Relative RT</b>	(TR relatif) Pour les analytes qui utilisent un standard interne, affiche le ratio du <b>Retention Time</b> sur l' <b>IS Retention Time</b> . Pour les standards internes ou pour les analytes sans standard interne, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	O
<b>Reportable</b>	(Déclarable) Indique si le résultat est inclus dans les rapports, les exports et les transferts vers le LIMS.	Nombre	O
<b>Retention Time</b>	(Temps de rétention) Affiche le temps de rétention réel du pic détecté en minutes.	Nombre	O
<b>Retention Time Delta (min)</b>	(Delta temps de rétention) Montre la différence entre le temps de rétention défini pour la masse et le temps de rétention réel.	Nombre	N
<b>Retention Time Error (%)</b>	(Erreur de temps de rétention (%)) Affiche le pourcentage d'erreur trouvé entre « Found at RT » et « Expected RT ».  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Nombre	N
<b>RT Confidence</b>	(Confiance TR) Affiche la confiance dans la pointe de retenue.  Applicable aux flux de travail qualitatifs seulement.	Text	N
<b>Sample Comment</b>	(Commentaire échantillon) Affiche un commentaire spécifié par l'utilisateur concernant l'échantillon.	Text	O

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Sample ID</b>	<p>(ID échantillon) Affiche un identifiant spécifié par l'utilisateur pour l'échantillon. Le <b>Sample ID</b> est spécifié dans l'éditeur de lots avant la soumission de l'échantillon pour acquisition.</p> <p>Si le flux de travail d'ajout standard est activé dans la méthode de traitement, alors le <b>Sample ID</b> est utilisé comme identificateur de groupe pour chaque groupe d'ajout standard. SCIEX OS associe chaque échantillon avec une concentration de l'analyte inconnue aux échantillons auxquels des concentrations connues et variées du même analyte ont été ajoutées.</p> <p>Le <b>Sample ID</b> peut contenir jusqu'à 252 caractères. Le <b>Sample ID</b> ne peut pas contenir l'un des caractères non valides suivants : \ / : * ? " &lt; &gt;   = ou les caractères 0 à 31 extraits du tableau ASCII.</p>	Text	O
<b>Sample Index</b>	<p>(Index de l'échantillon) Affiche l'index de l'échantillon actuel.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Cette colonne est verrouillée et toujours affichée du côté gauche du tableau de résultats.</p> <hr/>	Nombre	O

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Sample Name</b>	<p>(Nom échantillon) Affiche un nom spécifié par l'utilisateur pour l'échantillon. Le <b>Sample Name</b> est spécifié dans l'éditeur de lots avant la soumission de l'échantillon pour acquisition.</p> <p>Le <b>Sample Name</b> doit contenir de 1 à 252 caractères. Le <b>Sample Name</b> ne peut pas contenir l'un des caractères non valides suivants : \ / : * ? " &lt; &gt;   = ou les caractères 0 à 31 extraits du tableau ASCII.</p> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Cette colonne est verrouillée et toujours affichée du côté gauche du tableau de résultats.</p>	Text	O
<b>Sample Type</b>	(Type d'échantillon) Indique le type d'échantillon.	Text	O
<b>Scanned Barcode</b>	(Code-barres lu) Affiche le code-barres lu avant l'injection.	Text	O
<b>Signal / Noise</b>	<p>(Signal / Bruit) Affiche une estimation du ratio entre la hauteur de pic pour le pic détecté et le bruit présent dans le chromatogramme.</p> <p>Lors de l'utilisation de l'algorithme d'intégration AutoPeak, le bruit est estimé à l'aide du bruit relatif calculé et de la référence au point culminant du pic. L'algorithme MQ4 utilise une approche similaire, si ce n'est que la référence est estimée à l'aide de la totalité du chromatogramme.</p>	Nombre	O
<b>Slope of Baseline</b>	<p>(Pente de la ligne de base) Indique la pente du pic intégré à partir de la ligne de base :</p> $((\text{intensité à l'arrêt du pic}) - (\text{intensité au début du pic})) \div \text{largeur du pic}$	Nombre	N
<b>Start Time</b>	(Temps de début) Affiche le temps de rétention de début du pic détecté en minutes.	Nombre	O



Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Start Time at 10%</b>	(Temps de début à 10 %) Affiche le temps en minutes le long de la partie avant du pic où l'intensité est à 10 % de l'amplitude du pic.	Nombre	N
<b>Start Time at 5%</b>	(Temps de début à 5%) Affiche le temps en minutes le long de la partie avant du pic où l'intensité est à 5% de l'amplitude du pic.	Nombre	N
<b>Std Addition Accuracy</b>	<p>(Précision ajout std) Indique la précision des échantillons de concentration connue qui ont été quantifiés par l'ajout de standards de concentrations variées. Quand le flux de travail d'ajout standard est activé dans la méthode de traitement, le <b>Sample Type</b> pour tous les échantillons est automatiquement défini sur <b>Standard</b>. Si le <b>Sample Type</b> est défini sur un autre type, ou si le flux de travail d'ajout standard n'est pas activé, cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A). Pour les échantillons de concentration connue, tels qu'un échantillon de contrôle qualité dans un lot, la <b>Std Addition Accuracy</b> est définie comme :</p> $100 \% \times (\text{concentration calculée d'ajout std}) / (\text{concentration réelle d'ajout std}).$	Nombre	N
<b>Std Addition Actual Concentration</b>	(Concentration réelle d'ajout std) Affiche la concentration connue attendue spécifiée par l'utilisateur pour les échantillons qui sont quantifiés par ajout standard. Par exemple, un échantillon de contrôle de qualité dans un lot. Si le <b>Sample Type</b> n'est pas défini comme <b>Standard</b> , alors cette valeur indique <b>N/A</b> (N/A).	Nombre	N

## Instructions d'utilisation—Traitement

Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Std Addition Calculated Concentration</b>	<p>(Concentration calculée d'ajout std) Indique la valeur de la concentration rétrocalculée en extrapolant la courbe d'ajout de standard à l'ordonnée X en utilisant la régression linéaire et non la pondération. Pour les échantillons quantifiés par ajout de standard, la <b>Std Addition Calculated Concentration</b> est définie par :</p> <p>Ordonnée/Pente.</p> <p>Si le <b>Sample Type</b> n'est pas <b>Standard</b>, si le flux de travail d'ajout de standard n'est pas activé dans la méthode de traitement ou si aucun pic n'est détecté dans les échantillons non supplémentés d'un groupe d'ajout de standard, alors cette valeur est définie sur <b>N/A</b> (N/A).</p>	Nombre	N
<b>Tailing Factor</b>	<p>(Facteur d'étalement) Affiche la distance séparant la ligne centrale du pic de la pente arrière, divisée par deux fois la distance séparant la ligne centrale du pic de la pente avant. Toutes les mesures sont réalisées à 5 % de l'amplitude maximum du pic.</p>	Nombre	N
<b>Time Since First Sample (min)</b>	<p>(Durée depuis le premier échantillon (minutes)) Indique la durée écoulée, en minutes, depuis le début de l'acquisition du premier échantillon.</p>	Nombre	N
<b>Time Since Last Sample (sec)</b>	<p>(Durée depuis le dernier échantillon (secondes)) Indique la durée écoulée, en secondes, depuis le début de l'acquisition du dernier échantillon.</p>	Nombre	N
<b>Total Width</b>	<p>(Largeur totale) Affiche la largeur du pic chromatographique, en minutes, à la ligne de référence.</p>	Nombre	O

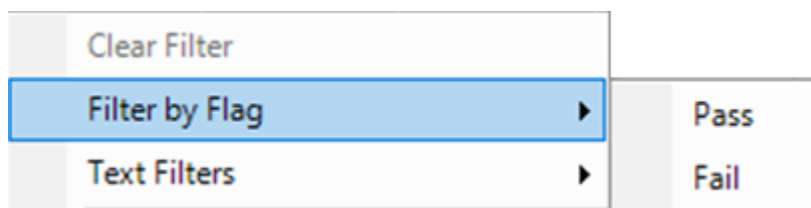
Libellé	Description	Format	LIS Supported
<b>Used</b>	<p>(Utilisé) Indique si le résultat est utilisé.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Pour tous les échantillons, une case cochée indique que le résultat est utilisé pour le calcul des valeurs de référence et l'exécution des règles de marquage.</li> <li>• Pour les échantillons standard, une case cochée indique que le résultat est utilisé pour la construction de la courbe d'étalonnage, la régression et les calculs statistiques.</li> <li>• Pour les échantillons CQ, une case cochée indique que le résultat est utilisé pour le calcul des statistiques du contrôle qualité.</li> <li>• Pour les autres types d'échantillon, une case cochée indique que le résultat est utilisé dans les calculs.</li> </ul>	Nombre	O
<b>Vial Number</b>	(Nombre de flacons) Affiche le nombre de flacons dans l'auto-échantillonneur utilisé pour acquérir les données, comme indiqué initialement dans le lot.	Text	O
<b>Width at 10%</b>	(Largeur à 10 %) Affiche la largeur du pic mesurée à 10 % de la hauteur de pic.	Nombre	N
<b>Width at 5%</b>	(Largeur à 5%) Affiche la largeur du pic mesurée à 5% de la hauteur de pic.	Nombre	N
<b>Width at 50%</b>	(Largeur à 50 %) Affiche la largeur de pic chromatographique, en minutes, du pic détecté mesuré à la moitié de l'intensité culminante.	Nombre	O
<b>XIC Width (Da)</b>	(Largeur XIC (Da)) Indique la largeur, en daltons, du chromatogramme d'ions extraits.	Nombre	O
<b>XIC Width (ppm)</b>	(Largeur XIC (ppm)) Indique la largeur, en ppm (parties par million), du chromatogramme d'ions extraits.	Nombre	O

### Filtres d'acceptation

Utilisez l'option **Filter by Flag** dans le menu Filter pour une colonne du tableau de résultats afin de déterminer si la colonne doit être filtrée selon les critères d'acceptation. Le tableau de résultats peut être filtré comme suit par des critères d'acceptation :

- **Pass:** Affiche les lignes correspondant aux critères qui ont été définis dans la méthode de traitement.
- **Fail:** Affiche les lignes ne correspondant pas aux critères qui ont été définis dans la méthode de traitement.

#### Illustration 6-26 : Filter By Flag



Des filtres d'acceptation peuvent être sélectionnés pour toute colonne à laquelle une règle de marquage a été appliquée, de même que les critères d'acceptation suivants :

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Asymmetry Factor
- Calculated Concentration
- Concentration Acceptance
- Integration Acceptance
- Quality
- Retention Time Delta (min)
- Retention Time Error (%)
- Total Width

### Voyants de confiance

Utilisez les critères d'acceptation pour définir les lignes de qualification. Une ligne de qualification est une ligne dans laquelle les critères d'acceptation correspondent aux critères définis dans la méthode de traitement.

Illustration 6-27 : Lignes de qualification

Define a qualifying row:

Ion ratio	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Frag. mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
RT	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<sup>14</sup> C Isotope	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Library	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
C <sub>n</sub> H <sub>n</sub> Formula	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Les voyants indiquent l'indice de confiance pour chaque ligne à laquelle une règle qualitative ou une règle d'acceptation de ratio d'ions est appliquée. Pour des informations sur les règles de marquage, consultez le document : *Système d'aide*.

**Conseil !** Le tableau de résultats peut être filtré à l'aide des filtres des voyants de confiance. Cochez la case **Qualify for Rules Filters** pour faire basculer la vue du tableau de résultats entre les lignes qui correspondent aux filtres de confiance et celles qui ne correspondent pas. Les filtres de confiance comprennent : Pass, Marginal, Fail, et N/A.

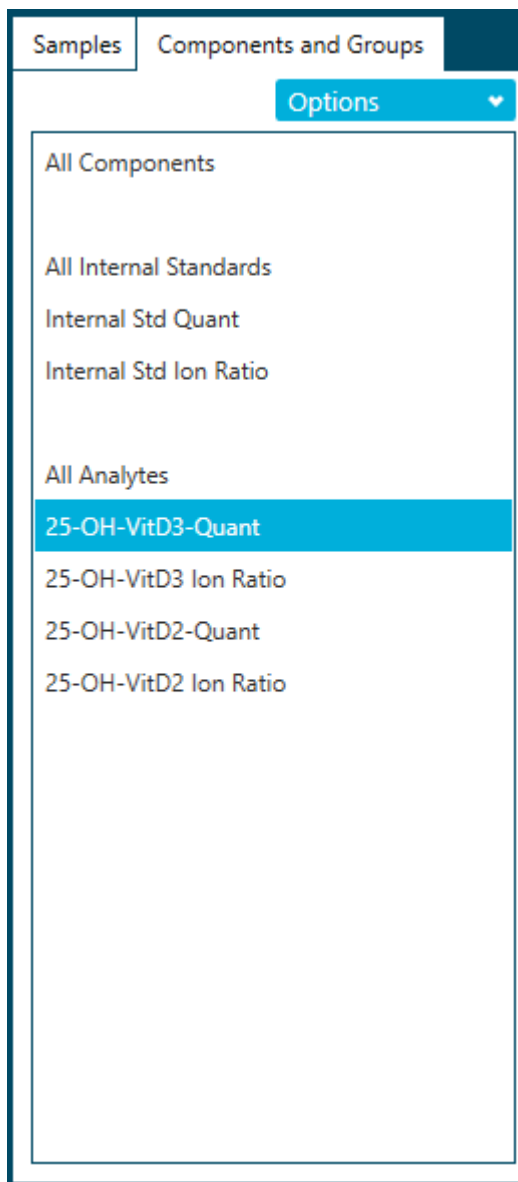
Tableau 6-6 : Voyants de confiance

Icône du voyant	Description
	Affiche les composants qui répondent aux niveaux de confiance définis dans la méthode de traitement.
	Affiche les composants qui répondent au niveau de faible différence en pourcentage défini dans la méthode de traitement.
	Affiche les composants qui répondent au niveau de différence inacceptable en pourcentage défini dans la méthode de traitement.
	Affiche les paramètres de confiance qui ne peuvent pas s'appliquer au composant.

## Liste des composants et des groupes

Quand un tableau de résultats est ouvert, une liste des composants et des groupes en cours est affichée sur le côté gauche de la fenêtre principale. Utilisez cette liste pour modifier les composants visibles dans le tableau de résultats ainsi que dans tout volet Peak Review ou Calibration Curve lié. Toutes ces informations sont affichées telles qu'elles ont été définies dans la méthode de quantification.

**Illustration 6-28 : Components and Groups (Composants et groupes)**



Cliquez sur l'un des éléments de la liste pour afficher uniquement les composants de cet élément. Utilisez la combinaison **Shift + clic** ou **Ctrl + clic** pour sélectionner plusieurs éléments, par exemple, deux analytes spécifiques.

---

**Conseil !** Il est possible d'élargir ou de rétrécir la liste en faisant glisser le bord droit du volet vers la gauche ou vers la droite.

---

L'ordre des lignes dans le tableau de résultats n'est pas affecté par le filtrage. Le tableau est prédéfini pour être ordonné d'abord par échantillon, puis par composant dans l'ordre indiqué dans la méthode de traitement.

Tableau 6-7 : Options


Étiquette	Description
<b>Show IS</b>	(Afficher IS) Cliquez pour afficher les lignes du tableau des résultats pour l'analyte actuellement sélectionné et le standard interne correspondant. Cela équivaut à cliquer sur l'analyte puis à cliquer sur le standard interne tout en appuyant sur <b>Ctrl</b> , afin que les deux soient sélectionnés.
<b>Find</b>	(Rechercher) Cliquez pour sélectionner les éléments de la liste qui correspondent au texte spécifié.

## Examen des pics

### Procédures préalables

- Ouvrez un tableau de résultats.

Utilisez le volet Peak Review pour :

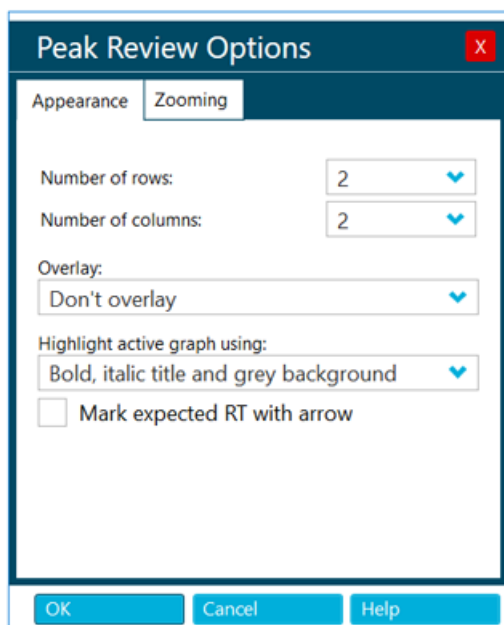
- Inspectez visuellement les chromatogrammes bruts afin que la qualité du processus de détection du pic puisse être déterminée.
  - Corriger les chromatogrammes qui ne sont pas intégrés correctement soit en ajustant les paramètres de détection du pic, soit en sélectionnant les points de début et de fin de l'intégration. Une fois qu'un chromatogramme a été réintégré, le tableau de résultats est automatiquement mis à jour avec la nouvelle aire du pic et les autres paramètres.
  - Inspecter visuellement les spectres MS et MS/MS pour le XIC intégré.
  - Passer en revue les résultats de la recherche de formules et de la recherche dans la bibliothèque et, si nécessaire, mettre à jour manuellement les résultats dans le tableau de résultats.
  - (Flux de travail de reconstruction de masse) Inspecter visuellement les spectres Average et Reconstruction.
  - (Flux de travail de reconstruction de masse) Corriger les chromatogrammes dans lesquels la région XIC n'a pas été sélectionnée correctement en réglant les paramètres de détection des pics ou en sélectionnant manuellement la région XIC. Après la sélection d'une nouvelle région XIC, les spectres Average et Reconstruction sont à nouveau générés
  - (Flux de travail de reconstruction de masse) Corriger les pics de masse qui n'avaient pas été sélectionnés correctement en réglant les paramètres Mass Peak Selection ou en sélectionnant manuellement le pic de masse. Une fois que le pic de masse a été modifié, le tableau de résultats est automatiquement mis à jour avec le nouveau pic et les autres paramètres.
1. Cliquez sur **Displays the peak review** ()
  2. Dans la liste **Components and Group** du volet gauche, sélectionnez un composant.

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

3. (Facultatif) Personnalisez la disposition du volet Peak Review avec le menu **View**. Pour une description des options **View**, consultez le document : *Système d'aide*.
4. (Facultatif) Cliquez sur **Options** > **Peak review display settings** pour modifier l'aspect du volet Peak Review. Par exemple, sélectionnez le nombre de chromatogrammes à afficher à la fois. Pour des descriptions des options, consultez le document : *Système d'aide*.

**Illustration 6-29 : Boite de dialogue Options Examen des Pics**



5. (Facultatif) Pour agrandir un pic, utilisez l'une des méthodes suivantes :
  - Cliquez sur **Options** > **Peak review display settings** puis sur **Zooming** pour modifier les paramètres de zoom des pics.
  - Faites glisser le curseur sur la zone à agrandir sur l'axe X ou Y.
6. (Facultatif) Pour agrandir un pic aux dimensions du volet Peak Review, sélectionnez le pic et cliquez sur **Peak magnifier** (  ).

---

**Conseil !** Lorsqu'une icône dans le volet Peak Review est noire, la fonction correspondante est activée. Pour la désactiver, cliquez à nouveau dessus.

---

7. (Facultatif) Pour visualiser et régler la région de bruit sur le graphique, cliquez sur **Options** > **Show Noise Regions** puis ajustez la région de bruit, le cas échéant. Consulter la section : [Utilisation des régions de bruit](#).

---

**Remarque :** Les régions de bruit ne peuvent être ajustées que si l'algorithme de ratio signal sur bruit **Peak to Peak** ou **Standard Deviation** est utilisé.


---

8. Si un chromatogramme ou un graphique de reconstruction contient plusieurs pics et qu'un pic incorrect est intégré, faites-le glisser sur le bon pic pour définir un nouveau




temps de rétention attendu ou un poids moléculaire attendu. Au besoin, ajustez le résultat de pic et les paramètres d'intégration.


9. (Facultatif) Pour appliquer les nouveaux paramètres à tous les échantillons du groupe ou du composant de l'échantillon, utilisez les options du menu contextuel. Pour plus d'informations, consultez la section : [Travail avec les pics dans le volet Peak Review](#).
- 

**Conseil !** Pour afficher les pics intégrés, cliquez sur **Displays the peak review** (). Dans le volet Peak Review, sélectionnez **Options > Show navigation controls**. Cliquez ensuite sur les icônes de navigation. Pour une description des icônes, consultez le document : *Système d'aide*.

---


**Conseil !** Effacez l'intégration en cliquant sur **Set peak to "not found"** (). L'utilisateur peut afficher les données brutes avant d'intégrer manuellement le pic. Il est impossible d'éditer les paramètres d'intégration.

---


10. Cliquez sur **Enable manual integration mode** () dans le volet Peak Review pour utiliser le mode d'intégration manuelle.
  11. Faites glisser le curseur de la base d'un côté du pic d'intérêt vers l'autre. La pic est maintenant intégrée manuellement et les paramètres d'intégration utilisés précédemment ne sont pas disponibles.
- 

**Conseil !** Si le pic vient d'être modifié, il peut être ramené à la méthode d'origine en cliquant avec le bouton droit de la souris puis en cliquant sur **Revert Peak to Original Method**.

---

**Conseil !** Pour effacer l'intégration manuelle et activer les champs des paramètres d'intégration, cochez la case **Manual Integration** puis cliquez à nouveau sur **Enable manual integration mode** ().

---

12. (Facultatif) Pour afficher le pic actuel dans l'espace de travail Explorer, cliquez sur **Open data exploration** ().

L'agrandissement actuel est conservé.

---

**Remarque :** L'intégration manuelle d'un pic persiste jusqu'à ce que l'utilisateur modifie l'intégration pour ce pic dans le volet Peak Review ou édite la méthode intégrée pour modifier le composant.

---

**Remarque :** Dans le flux de travail de reconstruction de masse, si un pic de reconstruction de masse est intégré manuellement, la région XIC et le spectre moyen correspondants persistent jusqu'à ce que l'utilisateur modifie l'intégration pour ce pic dans le volet Peak Review ou édite la méthode intégrée pour modifier le composant.

---

## Travail avec les pics dans le volet Peak Review

Tableau 6-8 : Caractéristiques de Peak Review

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Copier les paramètres d'intégration	<p>Utilisez cette commande conjointement avec <b>Paste Integration Parameters</b> pour copier les paramètres de recherche de pic depuis un chromatogramme vers un autre. Cette commande peut être utilisée si le même ajustement des paramètres doit être fait pour plusieurs chromatogrammes.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquez avec le bouton droit, puis cliquez sur <b>Copy Integration Parameters</b>.</li> <li>2. Pour appliquer la modification à tous les chromatogrammes pour le composant, utilisez la commande <b>Update Processing Method for Component</b>.</li> <li>3. Pour appliquer la modification à tous les chromatogrammes pour le groupe, utilisez la commande <b>Update Processing Method for Group</b>.</li> </ol>
Coller les paramètres d'intégration	<p>Utilisez cette commande conjointement avec <b>Copy Integration Parameters</b> pour copier les paramètres de recherche de pic depuis un chromatogramme vers un autre.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquez avec le bouton droit, puis cliquez sur <b>Copy Integration Parameters</b>.</li> <li>2. Cliquez avec le bouton droit dans un chromatogramme différent, puis cliquez sur <b>Paste Integration Parameters</b>.</li> </ol>
Mettre à jour la méthode de traitement pour un composant	<p>Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme spécifique, utilisez cette commande pour modifier la copie de la méthode de traitement enregistrée avec le tableau de résultats et utiliser ces paramètres pour le composant.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Réglez les paramètres de détection des pics, cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez <b>Update Processing Method for Component</b>.</li> </ul> <p>Pour le composant spécifique, tous les échantillons sont automatiquement intégrés afin de permettre une utilisation des nouveaux paramètres, et le volet Peak Review et le tableau de résultats sont mis à jour. Si des pics ont été intégrés manuellement, l'utilisateur est alors invité à préciser si la réintégration doit s'appliquer à tous les pics ou seulement à ceux qui n'ont pas été intégrés manuellement.</p>

Tableau 6-8 : Caractéristiques de Peak Review (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Mettre à jour la méthode de traitement pour un groupe	<p>(Pas applicable au flux de travail de reconstruction de masse) Semblable à l'option <b>Update Processing Method for Component</b>, si ce n'est que l'intégration s'applique à tous les composants qui appartiennent au même groupe que le composant pour le chromatogramme actif. Si l'utilisateur a attribué les divers composants à des groupes et si les composants attribués à un groupe donné doivent avoir le même temps de rétention, cette commande est utile, car elle permet à l'utilisateur de réinitialiser les paramètres, y compris le temps de rétention attendu, pour tous les composants du groupe à la fois. Cette commande n'est pas utile si les composants des groupes n'ont pas les mêmes temps de rétention.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Réglez les paramètres de détection des pics, cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez <b>Update Processing Method for Group</b>.</li> </ul>
Mettre à jour la méthode de traitement pour un groupe, excepté <b>Expected MW</b>	<p>(Flux de travail de reconstruction de masse uniquement) Semblable à l'option <b>Update Processing Method for Component</b>, si ce n'est que l'intégration s'applique à tous les composants qui appartiennent au même groupe que le composant pour le chromatogramme actif et le graphique de reconstruction. Si l'utilisateur a attribué les divers composants à des groupes et si les composants attribués à un groupe donné doivent avoir les mêmes paramètres d'intégration et de temps de rétention, cette commande est utile, car elle permet à l'utilisateur de réinitialiser les paramètres, y compris le temps de rétention attendu, pour tous les composants du groupe à la fois. Cette commande n'est pas utile si les composants des groupes n'ont pas les mêmes temps de rétention. Cette commande n'est pas appliquée à <b>Expected MW</b>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Réglez les paramètres d'intégration et de détection des pics, cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez <b>Update Processing Method for Group, Excluding Expected MW</b>.</li> </ul>

Tableau 6-8 : Caractéristiques de Peak Review (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Appliquer des paramètres d'intégration à un échantillon dans un groupe	<p>(Pas applicable au flux de travail de reconstruction de masse) Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme donné, utilisez cette commande pour appliquer les paramètres à tous les composants d'un échantillon appartenant au même groupe que le composé qui a été modifié.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Régalez les paramètres de détection des pics pour le chromatogramme, cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez <b>Apply integration parameters to sample within a group</b>.</li> </ul>
Appliquer des paramètres d'intégration à un échantillon dans un groupe, excepté <b>Expected MW</b>	<p>(Flux de travail de reconstruction de masse uniquement) Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme donné et les paramètres d'intégration pour un graphique, utilisez cette commande pour appliquer les paramètres à tous les composants d'un échantillon appartenant au même groupe que le composé qui a été modifié. Cette commande n'est pas appliquée à <b>Expected MW</b>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Régalez la détection des pics pour le chromatogramme et les paramètres d'intégration pour le pic de masse déconvolué, cliquez avec le bouton droit de la souris puis sélectionnez <b>Apply integration parameters to sample within a group, excluding Expected MW</b>.</li> </ul>
Restaurer un pic à la méthode d'origine	<p>Après avoir ajusté les paramètres de recherche de pic pour un chromatogramme spécifique, utilisez cette commande pour appliquer au chromatogramme les paramètres d'origine à partir de la copie de la méthode de traitement enregistrée avec le tableau de résultats dans le chromatogramme.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez <b>Revert Peak to Original Method</b>.</li> </ul>

Tableau 6-8 : Caractéristiques de Peak Review (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Restaurer tous les pics pour un composant	<p>Après avoir ajusté les paramètres de recherche de pic pour certains chromatogrammes, utiliser cette commande pour appliquer les paramètres d'origine à partir de la copie de la méthode de traitement enregistrée avec le tableau de résultats à tous les chromatogrammes pour le même composant que le chromatogramme actif. Si des pics ont été intégrés manuellement, l'utilisateur est alors invité à préciser si la réintégration doit s'appliquer à tous les pics ou seulement à ceux qui n'ont pas été intégrés manuellement.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez <b>Revert All Peaks for Component</b>.</li> </ul>

## Utilisation des régions de bruit

Si l'algorithme de ratio signal sur bruit **Peak to Peak** ou **Standard Deviation** est utilisé, les régions de bruit peuvent être ajustées de manière interactive dans la page Intégration de la méthode de traitement et le volet Peak Review.

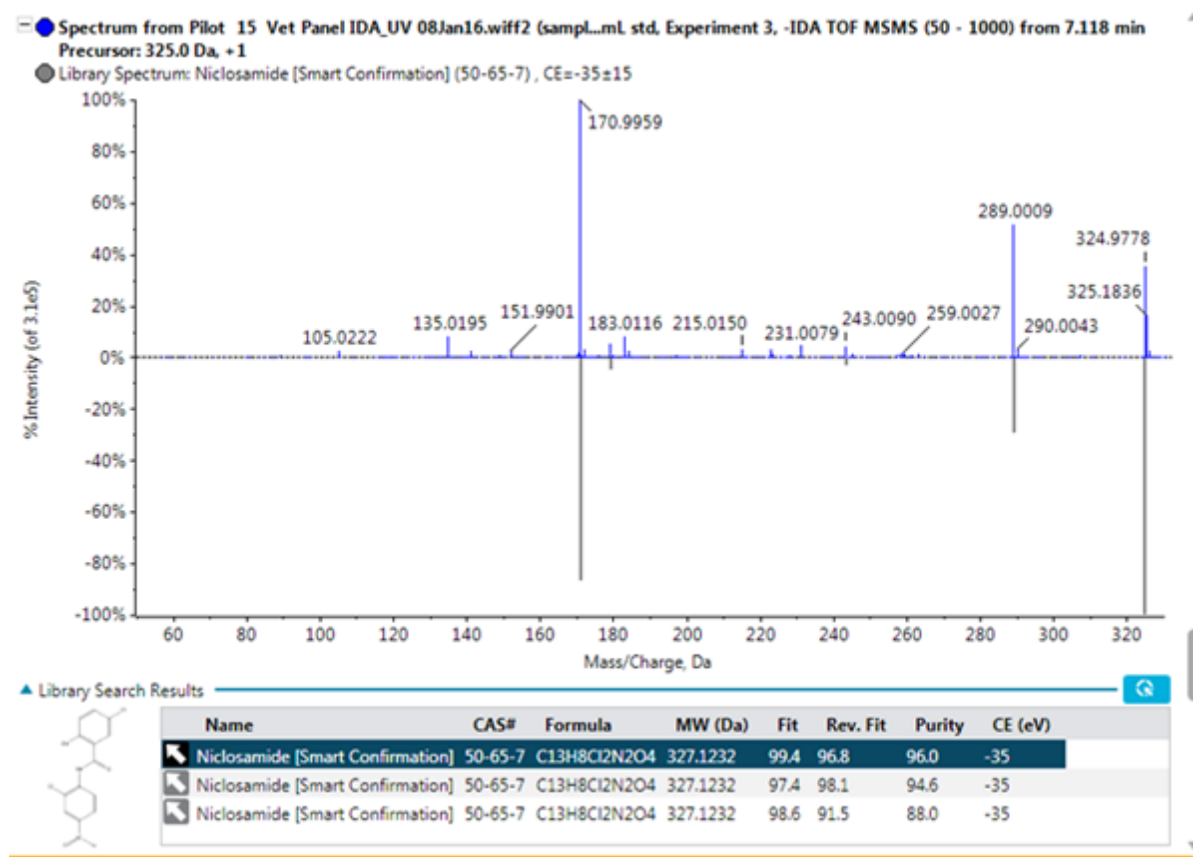
1. Cliquez sur la région de bruit sur le graphique et déplacez-la vers l'emplacement requis.
2. Déplacez le curseur sur le bord gauche ou droit de la région de bruit jusqu'à ce que la flèche à deux pointes apparaisse. Ensuite, faites glisser le bord jusqu'à la position souhaitée pour ajuster la taille de la région de bruit.



## Analyser des pics en utilisant les résultats de la recherche dans la bibliothèque ou les résultats de Formula Finder

**Conseil !** Pour modifier le nombre de lignes affichées dans le volet, cliquez sur **Options > Peak review display settings**. Vous pouvez également déplacer le haut du volet Peak Review vers le haut afin d'en augmenter la taille.

1. Dans un volet Peak Review, cliquez sur **View**, puis sur **XIC + MS/MS**, **XIC + MS** ou **XIC + MS + MS/MS**.  
Les résultats de la recherche sont affichés en dessous des graphiques.

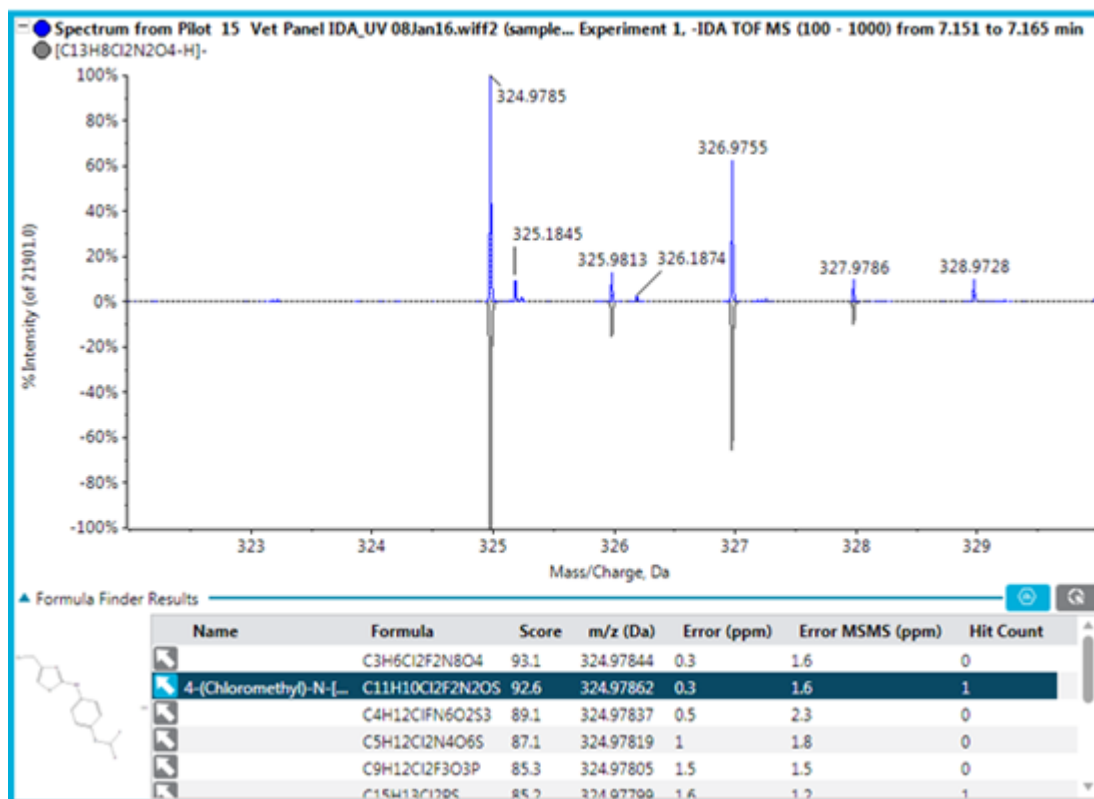
Illustration 6-30 : Résultats de la recherche dans la bibliothèque



2. Cliquez sur la flèche bleue pour développer **Library Search Results** et afficher le plus de correspondances possible.  
La structure chimique de la correspondance sélectionnée est également affichée dans le tableau.
3. Pour réduire le tableau, cliquez une nouvelle fois sur la flèche.  
Les résultats affichés dans le tableau réduit sont également affichés dans le tableau de résultats.
4. (Facultatif) Sélectionnez une ligne du tableau, puis cliquez sur  afin de mettre à jour les résultats dans le tableau de résultats et d'utiliser cette correspondance spécifique de la bibliothèque dans l'analyse.
5. (Facultatif) Pour mettre à jour la méthode de traitement avec les informations relatives au composé sélectionné, cliquez sur .
6. Pour ajouter un spectre à la base de données des bibliothèques, respectez la procédure suivante :
  - a. Cliquez avec le bouton droit sur le spectre, puis cliquez sur **Add spectrum to library**.  
La boîte de dialogue Add spectrum to library apparaît.
  - b. Mettez à jour les champs **Compound Name**, **Library** et **Precursor m/z**.

- c. Cliquez sur **OK**.
7. Cliquez sur la flèche bleue pour développer la liste **Formula Finder Results** et afficher le nombre maximal de résultats.

Illustration 6-31 : Formula Finder Results



La structure chimique des résultats sélectionnés de Formula Finder est également affichée dans le tableau si le composé a été mis à jour depuis ChemSpider.

8. Pour réduire le tableau, cliquez une nouvelle fois sur la flèche.  
Les résultats affichés dans le tableau réduit sont également affichés dans le tableau de résultats.
9. Pour mettre à jour la colonne dans le tableau de résultats avec le composé sélectionné, cliquez sur . **Formula Finder Results**
10. Pour mettre à jour la méthode de traitement avec les informations relatives au composé sélectionné, cliquez sur .

**Conseil !** Cliquez sur **Options** > **Get Chemspider hit count** afin d'afficher la colonne **ChemSpider Hit Count** dans le tableau sous le graphique.

11. Pour ouvrir l'application ChemSpider, cliquez sur .  
Consulter la section : [ChemSpider](#).





Élément	Description
4	Volet Fragment table, onglet Peaks : indique le nombre total de pics, le nombre de pics concordants et le pourcentage (%) d'intensité totale pour le composé sélectionné. La case située dans la colonne <b>Assigned</b> est cochée automatiquement pour les pics concordants.

Tableau 6-9 : Fonctionnalités de ChemSpider

Lorsque vous faites ceci...	... vous obtenez le résultat suivant
Saisie d'informations dans le champ en regard de l'icône <b>Filter XIC List</b>	Le volet Results est actualisé et ne contient que les résultats correspondant aux critères saisis.
Clic sur des entrées du volet Results	Les volets restants sont actualisés et présentent les informations associées à la sélection.
Clic sur des entrées de l'onglet Fragments du volet Fragment table	Les volets restants sont actualisés. Dans le volet Spectra, des flèches rouges apparaissent en haut et en bas du fragment concordant (en bleu). Dans le volet Structure, les composés de la structure chimique qui correspondent au fragment sont mis en évidence (gras).
Clic sur les entrées <b>Assigned</b> de l'onglet Peaks du volet Fragment table	Les volets restants sont actualisés. Dans le volet Spectra, des flèches rouges apparaissent en haut et en bas du fragment concordant (en bleu). Dans le volet Structure, les composés de la structure chimique qui correspondent au fragment sont mis en évidence (gras).
Clic sur la flèche vers le bas à droite du champ <b>ChemSpider results for</b> , puis sélection de l'option <b>ChemSpider web site</b>	Le site Web ChemSpider ( <a href="http://www.chemspider.com">www.chemspider.com</a> ) s'ouvre dans une fenêtre du navigateur. Pour obtenir des informations sur l'accès aux données, consultez l'aide ChemSpider.
Clic sur la flèche vers le bas à droite du champ <b>ChemSpider results for</b> , puis sélection de l'option <b>Refresh</b>	Toutes les modifications sont annulées et la session revient aux résultats de la recherche d'origine.
Cliquez sur <b>Select</b>	Les informations sélectionnées dans la session ChemSpider sont copiées dans le volet Formula Finder Results dans la session logicielle. La session ChemSpider se ferme.

## Conseils relatifs au volet Peak Review

- Triez le tableau des résultats dans une colonne particulière et examinez uniquement les chromatogrammes qui sont triés vers le haut ou le bas du tableau.
- Le volet Peak Review est systématiquement synchronisé avec le tableau de résultats correspondant et affiche les chromatogrammes pour les mêmes pics dans le même ordre

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

que dans le tableau. Les éventuelles modifications, telles que le tri des lignes, le filtrage des types d'échantillon ou la sélection de composants, qui sont apportées au tableau de résultats apparaissent automatiquement dans le volet Peak Review.

- Utilisez la barre de défilement à droite du volet pour parcourir les chromatogrammes disponibles. Lorsque le volet Peak Review, utilisez les touches fléchées vers le haut et vers le bas du clavier ou la molette de défilement de la souris pour parcourir les chromatogrammes.
- Sélectionnez une ligne dans le tableau de résultats en cliquant dans la région bleu clair à gauche de la première colonne pour afficher le pic correspondant dans le volet Peak Review. Si l'utilisateur fait défiler jusqu'à un chromatogramme spécifique dans le volet Peak Review, le tableau de résultats met en surbrillance la ligne correspondante, puis la fait apparaître à l'écran.
- Le groupement des nombres n'est pas pris en charge dans l'espace de travail Analytics. Les utilisateurs ne doivent pas regrouper des nombres dans une zone de texte, par exemple, les paramètres d'intégration, et une grille, par exemple, les tableaux de résultats.
- À tout moment, un chromatogramme est considéré comme étant actif, ce qui est indiqué par son titre qui apparaît en gras. Pour activer un chromatogramme spécifique, cliquez n'importe où dans le chromatogramme.

---

**ATTENTION : Risque de perte de données. Veillez à ne pas faire glisser le curseur dans un chromatogramme, car cela modifie le temps de rétention attendu et change l'intégration.**

---

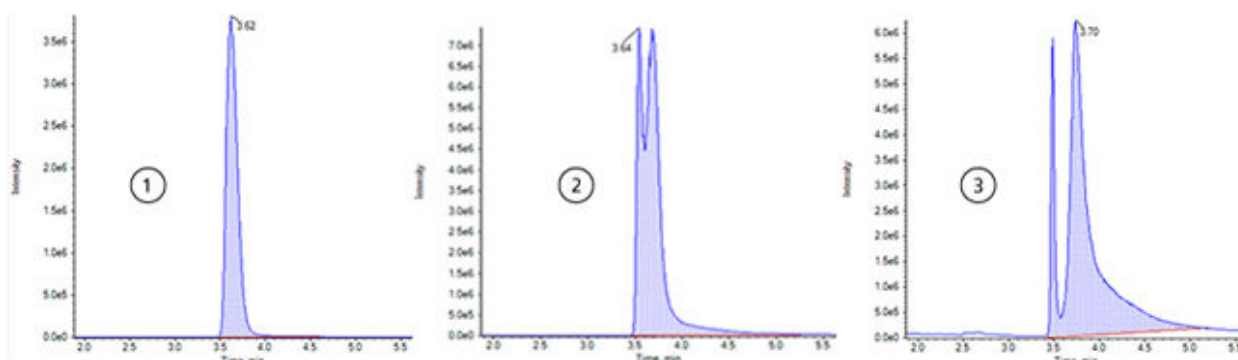
- Si l'utilisateur fait glisser le curseur sur un pic spécifique dans un chromatogramme, le paramètre d'intégration **Expected RT** est mis à jour avec le temps de rétention réel du pic. Le nouveau temps de rétention est alors appliqué automatiquement et le logiciel intègre le pic, ce qui met à jour le tableau de résultats en conséquence.
- (Flux de travail de reconstruction de masse) Si l'utilisateur fait glisser le curseur sur un pic spécifique dans un graphique de reconstruction, le paramètre **Expected MW** est mis à jour avec le poids moléculaire réel du pic. Le nouveau poids moléculaire est alors appliqué automatiquement et le logiciel intègre de nouveau le pic, ce qui met à jour le tableau de résultats en conséquence.
- (Flux de travail de reconstruction de masse) Si **Recentered on the largest XIC Peak** n'est pas sélectionné, l'utilisateur peut sélectionner manuellement la région XIC souhaitée. Le temps au centre de la région XIC devient le TR prévu, et le TR du pic le plus large dans la région XIC devient le TR trouvé.
- Si l'utilisateur examine les pics en mode d'intégration manuelle, le glissement du curseur en travers du pic intègre alors manuellement le pic sélectionné. Maintenir la touche **Shift** enfoncée en faisant glisser permet de conserver une ligne droite.
- Lorsqu'un chromatogramme devient actif, les paramètres d'intégration présentés à gauche du volet sont mis à jour pour refléter le chromatogramme nouvellement actif. Si l'utilisateur ajuste les paramètres d'intégration de pic puis clique sur **Apply**, cela affecte le chromatogramme actuellement actif.

- Les utilisateurs doivent inspecter la forme du pic pendant l'examen des pics afin d'identifier les pics potentiels saturés et de s'assurer qu'une intégration partielle ou incorrecte ne provoque pas des concentrations rapportées de manière incorrecte.
- Les utilisateurs doivent inspecter les chromatogrammes au cours de l'examen des pics afin de détecter la présence de pointes de bruit excessives qui pourraient indiquer des problèmes du système.
- Double-cliquez sur l'axe des Y pour le mettre à l'échelle en fonction du pic le plus intense de l'ensemble de données principal. Agrandissez en faisant glisser à l'intérieur de l'axe pour sélectionner une plage d'intensité.
- Double-cliquez dans l'axe des X pour faire revenir le graphique à la vue initiale dans laquelle toutes les données sont visibles. Agrandissez en faisant glisser à l'intérieur de l'axe pour sélectionner une période couverte.
- Lorsque vous naviguez d'un échantillon à un autre dans le tableaux de résultats, cliquez sur **Results > Cache all chromatograms for faster peak review** pour améliorer les performances.

Des échantillons de concentrations extrêmement élevées, nettement supérieures à la limite supérieure de quantification ou ULOQ, peuvent provoquer des pics de plus en plus larges et saturés avec des formes tordues ou divisées.

La figure suivante illustre la concentration maximale qui peut être quantifiée à l'aide de la régression linéaire.

**Illustration 6-33 : Exemples de pics non-saturés et saturés**



Élément	Description
1	Présente un pic acceptable qui peut être utilisé pour la quantification.
2	Présente un pic saturé. La concentration de l'échantillon qui a généré ce pic est nettement supérieur à l'ULOQ. À mesure que le pic se sature, il devient plus grand et le haut du pic est inversé en raison de la suppression du gain. Un tel pic doit être exclu de la quantification car une intégration partielle pourrait aboutir à un rapport incorrect des concentrations.

## Instructions d'utilisation—Traitement

---

Élément	Description
3	Présente la saturation extrême qui provoque une séparation du pic LC en deux pics. Un tel pic doit être exclu de la quantification car une intégration partielle pourrait aboutir à un rapport incorrect des concentrations.

## Analyser les données à l'aide des statistiques

### Procédures préalables

- Ouvrez un tableau de résultats.

Utilisez le volet Statistics pour afficher les informations relatives à la reproductibilité d'une analyse. Chaque ligne du tableau récapitule des informations comme la moyenne et l'écart-type, pour un groupe de pics liés du même analyte qui devraient donner la même réponse.

Examinez l'intégration des pics, la courbe d'étalonnage et les statistiques de l'échantillon à l'aide d'un processus itératif. La précision définie pour le champ **Actual Concentration** dans le tableau de résultats est également utilisée dans le tableau de statistiques.

**Remarque** : Reportez-vous aux procédures standard du laboratoire pour obtenir des informations sur les valeurs acceptées pour les statistiques, y compris le CV (%) et la précision.

Ouvrez un tableau de résultats, puis cliquez sur **Views > Statistics pane**.

## Colonnes du volet Statistics

Libellé	Description
Row	(Ligne) Affiche le numéro de la ligne.
Component Name	(Nom du composant) Affiche le nom de l'analyte.
Sample Name/ Actual Concentration	(Nom de l'échantillon/Concentration réelle) Lorsque les échantillons sont regroupés par concentration réelle, indique la concentration. Lorsque les échantillons sont groupés par nom d'échantillon, indique le nom de l'échantillon.
Num. Values	(Valeurs num.) Indique $m$ sur $n$ où $n$ est le nombre total d'échantillons à la concentration réelle, ou ayant le même nom, et $m$ le nombre de ces échantillons utilisé pour les calculs. Les échantillons ne sont pas utilisés si le pic correspondant ne peut pas être intégré ou si le champ <b>Used</b> a été effacé manuellement.
Mean	(Moyenne) Affiche la moyenne de l'échantillon utilisé.
Standard Deviation	(Écart-type) Affiche l'écart-type de l'échantillon utilisé.

Libellé	Description
<b>Percent CV</b>	(Pourcentage CV) Affiche le coefficient de variance exprimé en pourcentage : $100 * Mean / Standard Deviation$ .
<b>Accuracy</b>	(Précision) Affiche la valeur moyenne divisée par la concentration réelle exprimée en pourcentage : $100 * Mean / Actual Concentration$ . Ce champ est affiché uniquement en cas de regroupement par concentration réelle, et non en cas de regroupement par nom d'échantillon.
<b>Values</b>	(Valeurs) Affiche les valeurs individuelles des échantillons dans des colonnes supplémentaires. Si l'échantillon correspondant n'a pas pu être intégré, la mention <b>N/A</b> est affichée. Si le champ <b>Used</b> a été effacé manuellement, la valeur affichée est barrée.
<b>Group by</b>	<p>(Regrouper par) Spécifie la façon dont l'échantillon pour un analyte donné doit être groupé pour le calcul des statistiques. Les options suivantes sont disponibles :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Group by Concentration for Standards</b> (Regrouper par concentration pour standards) : Les échantillons standard sont regroupés par concentration réelle.</li> <li>• <b>Group by Concentration for QCs</b> (Regrouper par concentration pour CQ) : Les échantillons de contrôle qualité sont regroupés par concentration réelle.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for Standards</b> (Regrouper par nom d'échantillon pour standards) : Les échantillons standard en double sont regroupés par le champ <b>Sample Name</b>.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for QCs</b> (Regrouper par nom d'échantillon pour CQ) : Les échantillons de contrôle qualité en double sont regroupés par le champ <b>Sample Name</b>.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for All Samples</b> (Regrouper par nom d'échantillon pour tous les échantillons) : Tous les échantillons en double sont regroupés par le champ <b>Sample Name</b>.</li> </ul>

Libellé	Description
Metric	<p>Spécifie la mesure réelle utilisée pour le calcul des statistiques. Les options suivantes sont disponibles :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Calculated Concentration</b> (Concentration calculée) : Le champ <b>Calculated Concentration</b> du tableau de résultats est utilisé.</li><li>• <b>Area</b> (Aire) : Le champ <b>Area</b> du tableau de résultats est utilisé.</li><li>• <b>Height</b> (Amplitude) : Le champ <b>Height</b> du tableau de résultats est utilisé.</li><li>• <b>Calibration Y-Value</b> (Étalonnage valeur Y) : Le paramètre de régression spécifié pour l'analyte est utilisé. Utilisez soit <b>Area</b> ou <b>Height</b> pour un analyte sans standard interne correspondant, soit <b>Area Ratio</b> ou <b>Height Ratio</b> pour un analyte qui utilise un standard interne.</li></ul>
<b>Save Results and Export</b>	(Enregistrer les résultats et exporter) Cliquer pour enregistrer les résultats et exporter le tableau de statistiques. La boîte de dialogue Export Statistics apparaît.

### Conseils pour Statistics Pane

- Dans la liste **Components and Groups**, sélectionnez **All Components** pour afficher les entrées pour tous les analytes dans le tableau des statistiques. Sélectionnez un composant individuel pour afficher les entrées concernant cet analyte seulement. Si l'utilisateur sélectionne un étalon interne individuel dans la liste, le tableau de statistiques est alors vide. Consulter la section : [Liste des composants et des groupes](#).
- Cliquez sur l'une des cellules **Value** pour une ligne visible dans le Statistics pane pour sélectionner la ligne correspondante dans le tableau de résultats pour l'analyte et l'échantillon. Si le volet Peak Review est visible, il se lie alors au tableau de résultats et est mis à jour lorsque l'utilisateur clique sur la cellule correspondante.
- Triez les statistiques en cliquant sur l'un des en-têtes de colonne.
- Copiez le tableau de statistiques complet ou seulement les lignes d'intérêt en sélectionnant les lignes puis en appuyant sur **Ctrl+C**.
- Utilisez la liste **Group by** pour spécifier la manière dont l'échantillon, pour un analyte donné, doit être regroupé pour le calcul des statistiques.
- Utilisez la liste **Metric** pour spécifier la mesure utilisée pour le calcul des statistiques, la concentration calculée, l'aire, etc.
- Ajustez les largeurs de colonnes pour optimiser l'affichage. Ces largeurs sont conservées lors de l'affichage suivant du Statistics pane.
- Pour modifier le format et la précision pour le tableau des statistiques, modifiez-les dans le tableau de résultats. Consulter la section : [Personnaliser le tableau de résultats](#).


- Pour modifier l'option **Use Peak** pour une valeur individuelle, cliquez avec le bouton droit dans la cellule dans le Statistics pane, puis sélectionnez **Use Peak**. La colonne **Use Peak** du tableau de résultats est mise à jour.

## Afficher la courbe d'étalonnage

### Procédures préalables

- Ouvrez un tableau de résultats.

Utilisez la courbe d'étalonnage pour déterminer la concentration d'une substance dans un échantillon inconnu en comparant l'échantillon inconnu à un ensemble d'échantillons standard dont la concentration est connue. Voir la section: [Calibration Curves](#).

1. Cliquez sur **Displays the Calibration Curve** ()
2. Pour définir les options de régression, cliquez sur **Regression**. Consultez le document : *Système d'aide*.

## Exporter un étalonnage

Utilisez l'option Export calibration pour enregistrer une copie de l'équation d'étalonnage pour tous les analytes associés au tableau de résultats actif dans un fichier externe (mqcal). Ceci permet à l'utilisateur d'appliquer l'étalonnage d'un ensemble d'échantillons standard à d'autres échantillons qui ne font pas partie du même tableau de résultats.

Le flux de travail type est le suivant :

1. Créez un nouveau tableau de résultats contenant uniquement le standard.
2. Utilisez le volet Peak Review pour s'assurer que l'intégration a réussi.
3. Dans le volet Calibration Curve, cliquez sur **Options > Export calibration (and save results)** pour enregistrer une copie de l'étalonnage.
4. Créez un nouveau tableau de résultats contenant des échantillons de concentration inconnue.
5. Dans le volet Calibration Curve, cliquez sur **Options > Assign external calibration** pour appliquer l'équation d'étalonnage exportée au nouveau tableau de résultats.

---

**Remarque :** Les utilisateurs peuvent également spécifier le fichier d'étalonnage (mqcal) à appliquer au nouveau tableau de résultats.

---

Si vous apportez des modifications au tableau de résultats d'origine, avec les échantillons standard, le tableau de résultats doit être exporté à nouveau pour enregistrer l'équation d'étalonnage mis à jour. Les étalonnages exportés précédemment ne sont pas automatiquement mis à jour.

## Analyser les données à l'aide des tracés métriques

### Procédures préalables

- Ouvrez un tableau de résultats.

Utiliser un tracé métrique pour tracer les valeurs dans une colonne Results Table par rapport au numéro de ligne ou à une autre colonne. Ces tracés constituent une aide utile pour l'examen des données visuelles.

Si une colonne est sélectionnée, le tracé obtenu présente alors les valeurs de la colonne en fonction du numéro de ligne dans le tableau. Si deux colonnes sont sélectionnées, les valeurs des colonnes sont alors tracées l'une par rapport à l'autre. La première des deux colonnes à sélectionner contient les valeurs X et la seconde contient les valeurs Y.

1. Sélectionner une ou deux colonnes dans le tableau de résultats.

---

**Conseil !** Pour sélectionner une deuxième colonne, appuyez sur **Ctrl** tout en cliquant sur l'en-tête de colonne.

---

2. Cliquez sur **More > Create Metric Plot with new settings**.

3. Dans le tracé métrique, cliquez sur **Link** puis sur **Link to results table columns** ou **Link to results table rows** pour associer le défilement dans le tableau de résultats au tracé métrique.

Pour plus d'informations sur le menu **Link**, consultez le document : *Système d'aide*.

4. Pour mettre à jour le tracé métrique, sélectionnez les lignes d'intérêt dans le tableau de résultats puis, dans le tracé métrique, cliquez sur **Link > Plot selected rows only**.

---

**Conseil !** Pour sélectionner plusieurs lignes, appuyez sur **Ctrl** pendant que vous sélectionnez les lignes.

---

5. (Facultatif) Personnalisez les options Metric Plot en sélectionnant des options depuis le menu **Options**. Pour des descriptions des options, consultez le document : *Système d'aide*.

### Conseils relatifs aux tracés métriques

- Si l'utilisateur clique avec le bouton gauche de la souris sur un point de données, la ligne correspondante du tableau de résultats est alors automatiquement sélectionnée et apparaît. Si le volet Peak Review est ouvert, il se met alors également à jour pour afficher le chromatogramme correspondant. C'est une méthode pratique pour procéder à un examen des pics pour les données aberrantes.
- La zone de titre affiche toujours le nom du tracé actif. Si des tracés pour plusieurs composants sont superposés, basculez alors le titre entre l'affichage des informations pour tous les tracés ou seulement le tracé actif en cliquant sur le signe plus (+) à gauche du titre. Activez un tracé spécifique en cliquant sur le titre ou sur le point de couleur à gauche du titre correspondant ou en sélectionnant un point de données dans le tracé métrique.



- Le tracé métrique peut servir à tracer les aires de pic pour les échantillons d'étalon interne ou de CQ afin de surveiller les éventuels écarts ou tendances.

## Modifier des modèles de rapport

**ATTENTION : Risque de perte de données.** Afin d'empêcher les utilisateurs de modifier les modèles, vérifiez que les modèles du logiciel Reporter sont placés dans des dossiers sécurisés, en lecture seule et accessibles en écriture uniquement par les administrateurs système.

L'utilisateur est responsable de la validation du modèle personnalisé.

- Ouvrez le modèle docx.

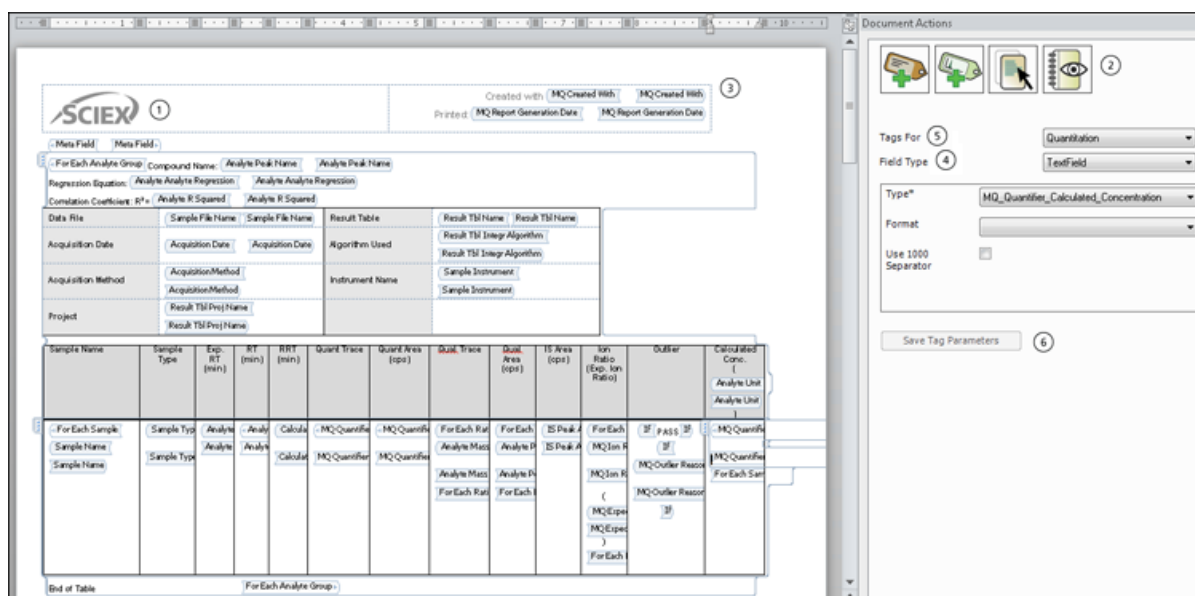
**Conseil !** Les modèles sont placés dans

C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter.

Lorsqu'une aire est sélectionnée, l'éditeur de modèle Reporter s'ouvre sur la droite.

L'éditeur de modèle est automatiquement renseigné à l'aide des informations d'étiquette.

Illustration 6-34 : Éditeur de modèle Reporter



Élément	Description
1	Modèle de rapport affichant les étiquettes actuelles.

Élément	Description
2	<p>Icônes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ajouter une nouvelle étiquette.</li> <li>• Ajouter une étiquette image.</li> <li>• Afficher la zone de contenu.</li> <li>• Afficher le journal des modifications du document.</li> </ul>
3	<b>Created with</b> : affiche le nom du logiciel qui fournit les informations de l'étiquette.
4	<b>Field Type</b> : affiche les types de champ applicables au logiciel.
5	Affiche une liste des attributs disponibles selon le type de champ sélectionné. Par exemple, le nom de l'étiquette et le format numérique.
6	<b>Save Tag Parameters</b> : cliquez sur ce bouton pour enregistrer les modifications. Si les modifications ne sont pas enregistrées, un message invitant l'utilisateur à enregistrer les modifications s'affiche.

2. Utilisez les procédures du tableau suivant.

**Tableau 6-10 : Fonctions du logiciel Reporter**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Modifier le type de champ.	Cliquer à l'intérieur de l'étiquette, sélectionner un nouveau type de champ, puis sélectionner les attributs.
Modifier les attributs du type de champ.	Cliquer à l'intérieur de l'étiquette, puis modifier les attributs selon les besoins.
Ajouter une étiquette.	Cliquer sur l'icône <b>Add new tag</b> , sélectionner Field Type, puis sélectionner les attributs.
Ajouter une image.	Cliquer sur l'icône <b>Add picture tag</b> , puis sélectionner les attributs.
Indiquer l'emplacement où une étiquette commence et se termine.	Cliquer sur l'icône <b>Show content area</b> .
Afficher le journal des modifications du document.	Cliquer sur l'icône <b>View document change log</b> .
Copier et coller des étiquettes.	<p>Copier les étiquettes sélectionnées, les coller dans le nouvel emplacement. Mettre les attributs du type de champ à jour.</p> <p>Les attributs ne sont pas copiés et doivent être sélectionnés.</p>

Tableau 6-10 : Fonctions du logiciel Reporter (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Naviguer entre les étiquettes.	Utilisez les flèches gauche et droite pour passer d'une étiquette à une autre.
Supprimer les étiquettes.	Effectuez l'une des opérations suivantes : <ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le curseur se trouve à gauche de l'étiquette, appuyer sur la touche <b>Delete</b>.</li> <li>• Si le curseur se trouve à droite de l'étiquette, appuyer sur la touche <b>Backspace</b>.</li> </ul>

3. Cliquer sur **Save Tag Parameters** après toute modification.

---

**Conseil !** Les informations obligatoires sont indiquées par un point d'exclamation rouge clignotant à gauche du champ.

---

## Modèles Reporter

La validation du modèle de rapport personnalisé est sous la responsabilité de l'utilisateur.

Certains modèles de rapport utilisent des requêtes. Les utilisateurs peuvent créer des requêtes en utilisant des formules basées sur Microsoft Excel pour évaluer, manipuler et présenter les données du tableau de résultats dans un rapport. La balise Metafield du modèle de rapport indique au rapport le nom du fichier de requête qu'il doit utiliser. Pour pouvoir utiliser des requêtes, le nom du fichier de requête doit être spécifié dans la balise MetaField du modèle de rapport. Les requêtes doivent également comporter l'extension « .query » pour pouvoir être reconnues en tant que requête. Les requêtes doivent être stockées dans le dossier Reporter qui stocke les modèles de rapport.

Nous recommandons à l'utilisateur de valider les résultats générés lorsqu'un modèle Reporter est utilisé, tout particulièrement lorsque des requêtes sont utilisées dans un modèle. Si des modifications sont apportées au modèle de rapport après validation, le modèle de rapport doit de nouveau être validé. Les modifications apportées au modèle de rapport incluent toute modification des balises Reporter ou des requêtes.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Qual tous pics	Rapport affichant, pour chaque échantillon, une section comprenant les informations sur le fichier, les informations sur l'échantillon, le tableau de résultats des analytes et les chromatogrammes superposés pour tous les analytes et tous les standards internes. Le tableau de résultats des analytes est imprimé tel qu'affiché dans le tableau de résultats. Tous les voyants de confiance qualitative se trouvent dans une liste au début du tableau.	S/O
Rapport d'analyte à 20 pour cent	Rapport comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier et un tableau XIC pour chaque témoin, standard, QC et 20 % de tous les inconnus.	Voici un exemple de modèle de rapport avec une requête jointe : Analyte20percent.Query.
Résumé d'analyte	Tableau des résultats indiquant le nom de l'échantillon, les concentrations calculées ou les données aberrantes pour tous les échantillons dans le lot pour l'analyte spécifique et le standard interne associé.	S/O
Courbe d'étalonnage	Rapport affichant les informations sur le fichier, le tableau de statistiques (standards) et la courbe d'étalonnage pour les analytes, une page par analyte.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Les standards pour lesquels la case Reportable est décochée n'apparaissent pas dans le tableau des données. Les statistiques ne sont pas affectées par l'état de la case Reportable.</li> <li>• Le rapport affiche le graphique et l'équation de régression, comme indiqué et calculé dans le volet Calibration Curve dans l'espace de travail Analytics, selon l'état de la colonne <b>Used</b>.</li> </ul>

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Quantification intacte, Tous les pics et Graphiques	Rapport affichant les entrées du tableau des résultats pour chaque échantillon. Toutes les colonnes visibles dans le tableau de résultats apparaissent dans le rapport. Le rapport inclut également le chromatographe XIC, le spectre moyen et le spectre de reconstruction, pour chaque échantillon et analyte.	Ce rapport est spécifique au flux de travail Mass Reconstruction.
Quant intacte résumé analyte et courbe d'étalonnage	Un rapport qui affiche les entrées du tableau de résultats, la courbe d'étalonnage et les données statistiques pour chaque analyte. Le tableau des résultats inclut le nom de l'échantillon, le type d'échantillon, le nom de l'analyte, la concentration réelle, la surface, la hauteur, le PM attendu, le PM, le delta PM, la concentration calculée et la précision.	Ce rapport est spécifique au flux de travail Mass Reconstruction.
Quant intacte résumé échantillon	Un rapport qui affiche les entrées du tableau de résultats pour tous les échantillons. Le tableau des résultats inclut le nom de l'échantillon, le type d'échantillon, le nom de l'analyte, la concentration réelle, la surface, la hauteur, le PM attendu, le PM, le delta PM, la concentration calculée, la précision et l'acceptation de la précision.	Ce rapport est spécifique au flux de travail Mass Reconstruction.
Tracé métrique	Rapport affichant, pour chaque analyte, une section incluant les informations sur le fichier et un tracé métrique de l'aire du pic de l'analyte.	L'état de la case <b>Reportable</b> n'affecte pas le contenu du rapport. Tous les points de données sont inclus même si les cases sont décochées.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport analyte MQ 1	Rapport comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier, un tableau de résultats d'échantillons et un tableau XIC pour chaque échantillon- IMPRIME GÉNÉRALEMENT 2 PAGES PAR ANALYTE POUR < 8 ÉCHANTILLONS	S/O
Rapport analyte MQ 2	Rapport comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier et un tableau XIC pour chaque échantillon inconnu - IMPRIME GÉNÉRALEMENT 2 PAGES PAR ANALYTE POUR < 8 ÉCHANTILLONS	Seuls les inconnus sont signalés.
Rapport analyte MQ 3	Rapport comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier et un tableau récapitulatif des échantillons inconnus.	Seuls les inconnus sont signalés.
Tableau condensé de rapport d'analyte MQ	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats. Le tableau est affiché sous la forme de 2 colonnes pour inclure davantage d'échantillons par page.	Seuls les inconnus sont signalés.
Rapport analyte MQ avec chromatogrammes	Rapport comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier, un tableau de résultats d'échantillons et un petit chromatogramme pour chaque échantillon.	Seuls les inconnus sont signalés.
Modèle blanc MQ	S/O	Seuls les informations de l'en-tête, le logo et les numéros de pages apparaissent dans le rapport.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Quant Pep MQ	S/O	À utiliser avec le jeu de données de quantification des peptides. Voir le deuxième exemple, sur la quantification absolue, dans le <i>Guide de l'utilisateur</i> pour le logiciel MultiQuant.
Résumé MQ QC 1 avec indicateurs	Rapport comprenant les informations sur le fichier, un tableau récapitulatif des QC par analyte (les valeurs dont le CV est supérieur à 20 % sont mises en surbrillance) et un tableau de résultats de QC détaillés (les valeurs dont la précision sort de la plage allant de 80 à 120 % sont mises en surbrillance).	Les contrôles de qualité avec la case <b>Reportable</b> décochée ne sont pas inclus dans le rapport et ne sont pas utilisés dans les calculs..
Rapport échantillon MQ 1	Rapport comprenant, pour chaque échantillon, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, des informations SI, un tableau de résultats des analytes et un tableau XIC avec IS et chaque analyte - IMPRIME GÉNÉRALEMENT 2 PAGES PAR ÉCHANTILLON POUR < 8 ÉCHANTILLONS	S/O
Rapport échantillon MQ 2	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, un TIC, des détails sur les échantillons, le XIC de l'analyte et des résultats sous forme de tableau - IMPRIME GÉNÉRALEMENT 2 PAGES PAR ÉCHANTILLON POUR < 8 ÉCHANTILLONS	Seuls les inconnus sont signalés.
Rapport échantillon MQ 3	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats.	Seuls les inconnus sont signalés.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Tableau condensé de rapport d'échantillon MQ	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats. Le tableau est affiché sous la forme de 2 colonnes pour inclure davantage d'analytes par page.	Seuls les inconnus sont signalés.
Rapport échantillon MQ avec chromatogrammes	Rapport comprenant, pour chaque échantillon, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, un tableau de résultats de l'analyte et un petit chromatogramme pour chaque analyte.	Seuls les inconnus sont signalés.



Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport échantillon MQ avec seuil de concentration	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et la somme des résultats.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Le fichier de requête associé est un rapport d'échantillon avec Concentration Threshold.query.</li> <li>• Les composants doivent être nommés « Cmpd X # », où X est tout caractère entre A et F, et # est toute valeur numérique.   <b>Exemple :</b> dans le rapport, un composant nommé « Cmpd A 1 » apparaît sous l'en-tête <b>Compound Group A</b> ; un composant nommé « Cmpd B 1 » apparaît sous <b>Compound Group B</b>, etc.</li> <li>• Si des composants sont dans le même groupe, seul le premier composant du groupe par ordre alphabétique est inclus dans le rapport.   <b>Exemple 1 :</b> si « Cmpd B 25 » et « Cmpd C 1 » appartiennent tous deux au groupe « Grp », alors « Cmpd C 1 » ne sera pas dans le rapport.   <b>Exemple 2 :</b> si « Cmpd A 1 », « Cmpd A 2 » et « Cmpd A 3 » ne sont pas assignés à des groupes, « Cmpd A 2 » et « Cmpd A 3 » ne seront pas dans le rapport.   <b>Exemple 3 :</b> si « Cmpd A 1 », « Cmpd A 2 » et « Cmpd A 3 » sont respectivement assignés aux groupes 1, 2 et 3, alors ces 3 composants seront dans le rapport sous l'en-tête <b>Compound Group A</b>.</li> </ul>

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport échantillon MQ avec ratios MRM 2	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, un tableau récapitulatif des résultats et la superposition de tous les XIC. Les ratios d'ion attendus sont calculés automatiquement à l'aide des standards disponibles. Les valeurs des ratios sont placées dans les colonnes personnalisées du tableau de résultats. Les valeurs au-delà de 20 % des ratios attendus sont marquées. Les noms des analytes quantificateurs doivent se terminer par un espace vide suivi du nombre 1. Les noms des analytes des ratios d'ion doivent se terminer par un espace vide suivi d'un nombre compris entre 2 et 9.	S/O

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport échantillon MQ avec ratios MRM UE	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats. Les ratios d'ion attendus sont calculés automatiquement à l'aide des standards disponibles. Les valeurs des ratios sont placées dans les colonnes personnalisées du tableau de résultats. Les valeurs au-delà des ratios attendus sont marquées (selon les directives de l'UE s'appliquant aux tolérances des ratios). Les noms des analytes quantificateurs doivent se terminer par un espace vide suivi du nombre 1. Les noms des analytes des ratios d'ion doivent se terminer par un espace vide suivi d'un nombre compris entre 2 et 9.	Le fichier de requête associé est <code>MRM ratios EU.query</code> .
Rapport échantillon MQ avec ratios MRM MQ EFAB 03	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats. Les ratios d'ion attendus sont calculés automatiquement à l'aide des standards disponibles. Les valeurs des ratios sont placées dans les colonnes personnalisées du tableau de résultats. Les valeurs au-delà de 20 % des ratios attendus sont marquées. Les noms des analytes quantificateurs doivent se terminer par un espace vide suivi du nombre 1. Les noms des analytes des ratios d'ion doivent se terminer par un espace vide suivi d'un nombre compris entre 2 et 9.	S/O

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport échantillon MQ avec ratios MRM	Rapport comprenant, pour chaque échantillon inconnu, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats. Les ratios d'ion attendus sont calculés automatiquement à l'aide des standards disponibles. Les valeurs des ratios sont placées dans les colonnes personnalisées du tableau de résultats. Les valeurs au-delà de 20 % des ratios attendus sont marquées. Les noms des analytes quantificateurs doivent se terminer par un espace vide suivi du nombre 1. Les noms des analytes des ratios d'ion doivent se terminer par un espace vide suivi d'un nombre compris entre 2 et 9.	Le fichier de requête associé est <code>MRM_ratios.query</code> .
Rapport échantillon MQ avec standards, QC et témoins	Rapport comprenant, pour chaque échantillon, une section incluant des informations sur le fichier, le tableau récapitulatif des standards, le tableau récapitulatif QC, le tableau des résultats de témoins ; puis pour chaque échantillon inconnu une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, des informations SI, un tableau de résultats des analytes et un tableau XIC avec IS et chaque analyte - IMPRIME GÉNÉRALEMENT 2 PAGES PAR ÉCHANTILLON POUR < 8 ANALYTES.	Les standards et contrôles de qualité avec la case <b>Reportable</b> décochée n'apparaissent pas dans les tableaux récapitulatifs correspondants dans le rapport et ne sont pas utilisés dans les calculs statistiques.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
MQ Tutorial Dataset Heavy Light	S/O	Ce rapport est destiné à être utilisé avec le jeu de données Tutorial Dataset Heavy Light. Voir le deuxième exemple, sur la quantification relative, dans le <i>Guide de l'utilisateur</i> pour le logiciel MultiQuant.
Per Sample Quant-Qual	Rapport affichant, pour chaque échantillon sélectionné, une section comprenant les informations sur le fichier, les informations sur l'échantillon et le tableau de résultats des analytes pour les analytes sélectionnés. Le tableau de résultats des analytes est imprimé tel qu'affiché dans le tableau de résultats. Tous les voyants de confiance qualitative se trouvent dans une liste au début du tableau.	S/O
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	Rapport affichant, pour chaque échantillon sélectionné, une section comprenant les informations sur le fichier, les informations sur l'échantillon et le tableau de résultats des analytes pour les analytes sélectionnés. Le tableau de résultats des analytes est imprimé tel qu'affiché dans le tableau de résultats. Tous les voyants de confiance qualitative se trouvent dans une liste au début du tableau.	L'état masqué d'une ligne prime sur l'état de la case <b>Reportable</b> . Si la case <b>Reportable</b> est cochée, mais la ligne est masquée, la ligne n'est pas signalée.

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Per sample Quant-Qual avec statistiques	Rapport affichant des composants pour chaque échantillon avec un tableau WYSIWYG. XIC, MS et MS/MS sont affichés. Un tableau récapitulatif des statistiques pour la surface est affiché à la fin du rapport.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Si le tableau des composants comporte des composants UV, le tracé UV est indiqué sous le graphique XIC dans le rapport.</li> </ul> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Si le nom du composant UV est au format [compound_nameuv] ou [uv], aucun tracé UV n'est signalé, car le suffixe uv est associé au rapport UV MS Qual.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Si un échantillon est libellé comme un QC et s'il y a 2 échantillons ou plus, la moyenne, l'écart-type et le %CV seront calculés et inclus dans un tableau récapitulatif QC à la fin du rapport.</li> <li>• Si la case <b>Reportable</b> est décochée pour une ligne QC, cette ligne ne sera utilisée pour aucun calcul dans le tableau récapitulatif QC.</li> </ul>
Per Analyte Quant-Qual	Rapport affichant, pour chaque analyte, une section incluant les informations sur le fichier, le tableau de résultats, les courbes d'étalonnage et les chromatogrammes incluant le standard interne et chaque analyte. Ce modèle est adapté à un tableau de résultats dans lequel un groupe a été défini.	S/O

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Positive Hits Qual	Rapport affichant, pour chaque échantillon sélectionné, une section comprenant les informations sur le fichier ; les informations sur l'échantillon ; le tableau de résultats des analytes sélectionnés ; les chromatogrammes superposés de tous les analytes, le standard interne et la XIC ; les spectres MS acquis/théoriques ; et les spectres MS/MS acquis/de bibliothèque pour chaque analyte sélectionné. Le tableau de résultats des analytes est imprimé tel qu'affiché dans le tableau de résultats. Tous les voyants de confiance qualitative se trouvent dans une liste au début du tableau.	S/O
Qual CSV report	Rapport au format csv affichant, pour chaque échantillon, une section comprenant les informations sur le fichier, les informations sur l'échantillon et le tableau de résultats des analytes.	Il est recommandé d'utiliser l'option CSV pour le format du rapport.
Résumé échantillon	Rapport affichant, pour chaque échantillon, une section du tableau résumé des analytes. Ce modèle de rapport est adapté à un tableau de résultats comportant des groupes.	S/O

Tableau 6-11 : Modèles par défaut (suite)

Modèle	Description du modèle (comme indiqué dans la boîte de dialogue Create Report)	Remarques supplémentaires
Rapport UV MS Qual	Rapport affichant, pour chaque échantillon, les composants de cet échantillon et le composant UV correspondant avec un tableau WYSIWYG. XIC, MS et MS/MS sont affichés avec les données UV. Un tableau récapitulatif des statistiques pour la surface est affiché à la fin du rapport.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Les données UVMS doivent être traitées avec la convention d'affectation de noms <i>compound 1</i> (toute chaîne) pour le composant du spectromètre de masse (MS) et <i>compound 1uv</i> (toute chaîne plus uv) pour le composant UV correspondant.</li> <li>• Seuls les voyants de confiance RT, d'istotope, de bibliothèque, d'erreur de masse et d'erreur de masse de fragment sont affichés.</li> <li>• Un tableau graphique est créé pour afficher les composants individuels du tableau des résultats, avec les informations XIC, tracé MS1, tracé MS/MS et d'en-tête du composé 1 et le tracé UV du composé 1uv. Voir <a href="#">Illustration 6-35</a>.</li> <li>• Les graphiques des analytes ne sont répétés que pour les expériences MS, pas pour les expériences UV.</li> <li>• Si un échantillon est libellé comme un QC et s'il y a 2 échantillons ou plus, la moyenne, l'écart-type et le %CV sont calculés et inclus dans un tableau récapitulatif QC à la fin du rapport. Voir <a href="#">Illustration 6-36</a>.</li> <li>• Si la case <b>Reportable</b> est décochée pour une ligne QC, cette ligne n'est utilisée pour aucun calcul dans le tableau récapitulatif QC.</li> </ul>



Illustration 6-35 : Tableau graphique

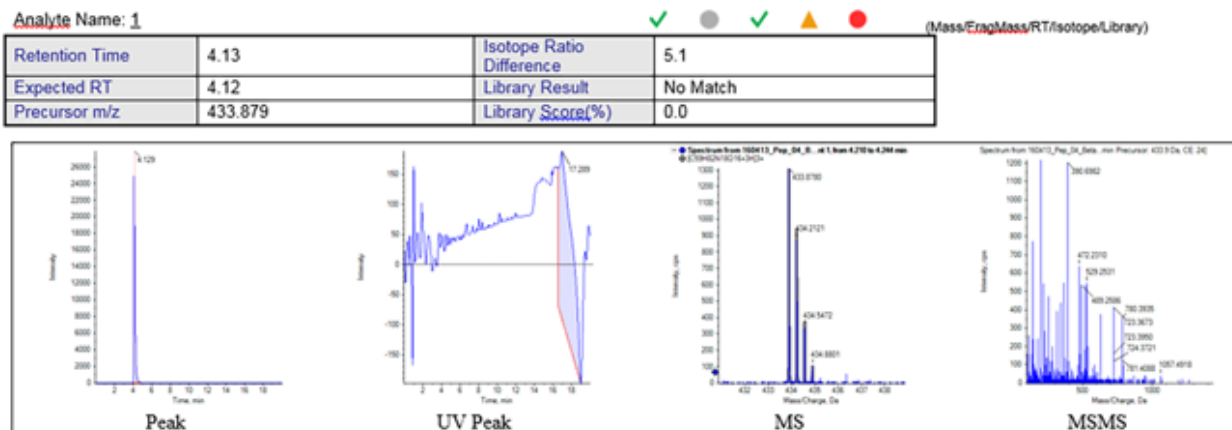


Illustration 6-36 : Tableau de statistiques

**Statistics** (Grouped by Concentration for QCs - Area)

Analyte Peak Name (MRM Transition)	Mean	Std. Deviation	% CV	Number of Values Used
1 (723.3573 - 723.3773)	1.062e4	7.367e2	6.93	2 of 2
2 (753.3091 - 753.3291)	2.215e4	6.858e2	3.10	2 of 2
3 (760.3353 - 760.3553)	9.332e3	1.955e1	0.21	2 of 2
4 (631.3450 - 631.3650)	3.244e4	1.110e3	3.42	2 of 2
5 (636.3373 - 636.3573)	1.144e5	3.962e2	0.35	2 of 2
6 (871.4354 - 871.4554)	6.479e4	1.198e3	1.85	2 of 2
7 (932.4493 - 932.4693)	2.183e4	7.301e2	3.34	2 of 2
8 (1000.5743 - 1000.5943)	2.553e4	5.007e2	1.96	2 of 2
9 (755.4352 - 755.4552)	1.127e5	8.422e3	7.48	2 of 2
10 (1184.5929 - 1184.6129)	3.576e4	7.231e2	2.02	2 of 2
11 (884.4871 - 884.5071)	5.183e4	1.512e3	2.92	2 of 2
12 (1176.5468 - 1176.5668)	1.670e4	1.848e2	1.11	2 of 2
13 (871.9418 - 871.9618)	1.597e5	5.501e2	0.34	2 of 2
14 (879.4236 - 879.4436)	1.868e5	5.182e3	2.77	2 of 2

Lorsqu'un problème survient, le logiciel Central Administrator Console (CAC) consigne les rapports d'erreurs et les avertissements affichés à l'écran. L'espace de travail Event Log contient les journaux des événements du système, notamment les erreurs, les avertissements et les messages.

Pour ouvrir cet espace de travail, cliquez sur la vignette Event Log de la page d'accueil.

**Tableau 7-1 : Colonnes de l'espace de travail Event Log**

Libellé	Description
<b>Current</b>	(Actuel) Une liste des événements actuels pour chaque sous-système.
<b>Severity</b>	(Gravité) Le type d'événement : information, erreur ou avertissement.
<b>Time</b>	(Heure) L'heure à laquelle l'événement s'est produit.
<b>Subsystem</b>	(Sous-système) Le sous-système sur lequel l'événement s'est produit.
<b>Event</b>	(Événement) Une description de l'événement. Cette information peut être utilisée pour résoudre le système.
<b>User</b>	(Utilisateur) Le nom de l'utilisateur et le système sur lequel l'événement s'est produit.  <b>Remarque :</b> Pour les événements déclenchés par une règle de décision, c'est l'utilisateur qui a soumis le lot.

## Registres d'événements

Les journaux suivants sont disponibles :

- **All** (Tous)
- **Device** (Appareil)
  - **LC** (LC)
  - **Mass Spectrometer** (Spectromètre de masse)
- **Workspace** (Espace de travail)
  - **Batch** (Lot)
  - **Explorer** (Explorateur)
  - **Devices** (Appareils)
  - **General** (Généralités)
  - **LC Method** (Méthode LC)

- **MS Method** (Méthode MS)
- **MS Tune** (Réglage MS)
- **Analytics** (Analytique)
- **Queue** (File d'attente)
- **Users** (Utilisateurs)
- **Configuration** (Configuration)

Une fois qu'un registre d'événements contient 20 000 enregistrements, SCIEX OS archive automatiquement les registres et commence un nouveau registre d'événements. Pour plus d'informations, consultez la section [Archives des registres d'événements](#).

## Afficher les journaux

1. Ouvrez l'espace de travail Event Log.
2. Cliquez sur un élément de la liste dans le volet de gauche pour afficher les journaux.

## Archiver les journaux

1. Ouvrez l'espace de travail Event Log.
2. Cliquez sur **Archive** > **Archive Log**.

Illustration 7-1 : Menu Archive : Archive Log

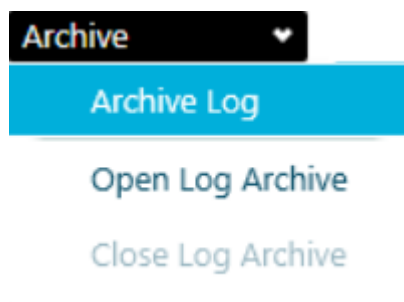
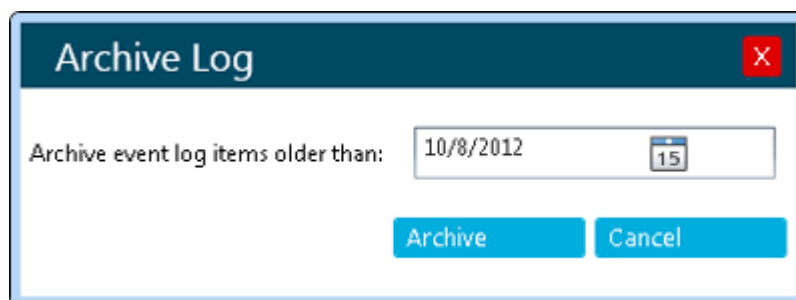


Illustration 7-2 : Boîte de dialogue Archive Log



3. Dans le champ **Archive event log items older than**, cliquez sur l'icône de date, puis sélectionnez une date.

## Événements

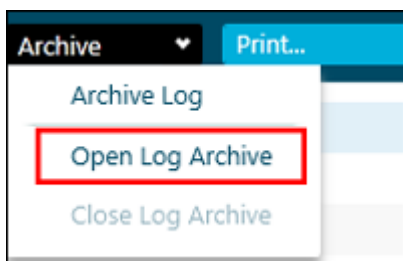
---

4. Cliquez sur **Archive**.

### Afficher les journaux archivés

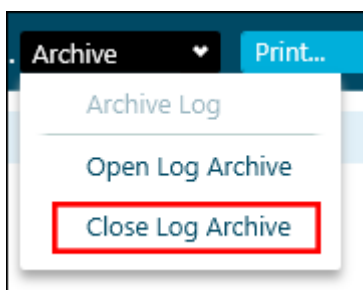
1. Ouvrez l'espace de travail Event Log.
2. Cliquez sur **Archive > Open Log Archive**.

Illustration 7-3 : Menu Archive : Open Log Archive



3. Ouvrez le fichier requis.
4. Cliquez sur **Archive > Close Log Archive**.

Illustration 7-4 : Menu Archive : Close Log Archive



## Imprimer des journaux

1. Ouvrez l'espace de travail Event Log.
2. (En option) Ouvrez un journal archivé. Consulter la section : [Afficher les journaux archivés](#).
3. Cliquez sur **Print**.  
La boîte de dialogue Print s'ouvre.
4. Sélectionnez une imprimante et cliquez sur **Print**.

## Archives des registres d'événements

Les registres d'événements s'accumulent dans registres d'événements et peuvent créer des fichiers volumineux difficiles à visualiser et à gérer.

Lorsqu'un registre d'événements atteint 20 000 enregistrements, il est archivé. Un enregistrement registre d'événements final est ajouté au registre d'événements, qui est alors sauvegardé sous un nom de fichier indiquant le type de registre d'événements ainsi que la date et l'heure. Un nouveau registre d'événements est créé. Le premier enregistrement dans le nouveau registre d'événements indique que le registre d'événements a été archivé.

Les archives de registres d'événements sont stockées dans le dossier  
C:\ProgramData\SCIEX\Clearcore2.Acquisition. Les noms de fichiers  
sont au format <logfile>Archive\_<YYYYMMDD>\_<HHMMSS>.data. Par exemple,  
CustomerLogArchive\_20220427\_172915.data.

Cette section explique comment utiliser la fonctionnalité d'audit.

## Afficher les enregistrements du registre d'audit

1. Ouvrez l'espace de travail Audit Trail.
2. Pour afficher le suivi d'audit pour la station de travail, cliquez sur **Workstation** dans le volet de gauche.
3. Pour afficher le suivi d'audit pour un projet, sélectionnez le projet dans le volet de gauche. Sélectionne ensuite l'un des éléments suivants :
  - **General Events** : pour afficher des registres d'audit qui s'appliquent au projet complet, tels que les modifications apportées à la carte d'audit et l'acquisition des échantillons.
  - **Analytics** : pour afficher les registres d'audit pour un tableau de résultats.
  - **All Project Events** : pour afficher des registres d'audit pour les événements généraux et les événements de traitement.

## Filtrer les événements audités à l'aide de la recherche par mot-clé


L'utilisateur peut filtrer les événements audités dans le journal d'audit à l'aide d'une recherche par mot-clé. La recherche met en surbrillance chaque occurrence du texte.

1. Ouvrez l'espace de travail Audit Trail.
2. Sélectionnez le registre d'audit à rechercher. Consulter la section : [Afficher les enregistrements du registre d'audit](#). Les enregistrements du registre d'audit s'affichent.
3. Saisissez le mot à trouver dans le champ **Find in Page**. Toutes les occurrences de ce mot sur la page sont mises en surbrillance.
4. Utilisez les boutons Next (▼) et Previous (▲) pour passer d'une correspondance à une autre.

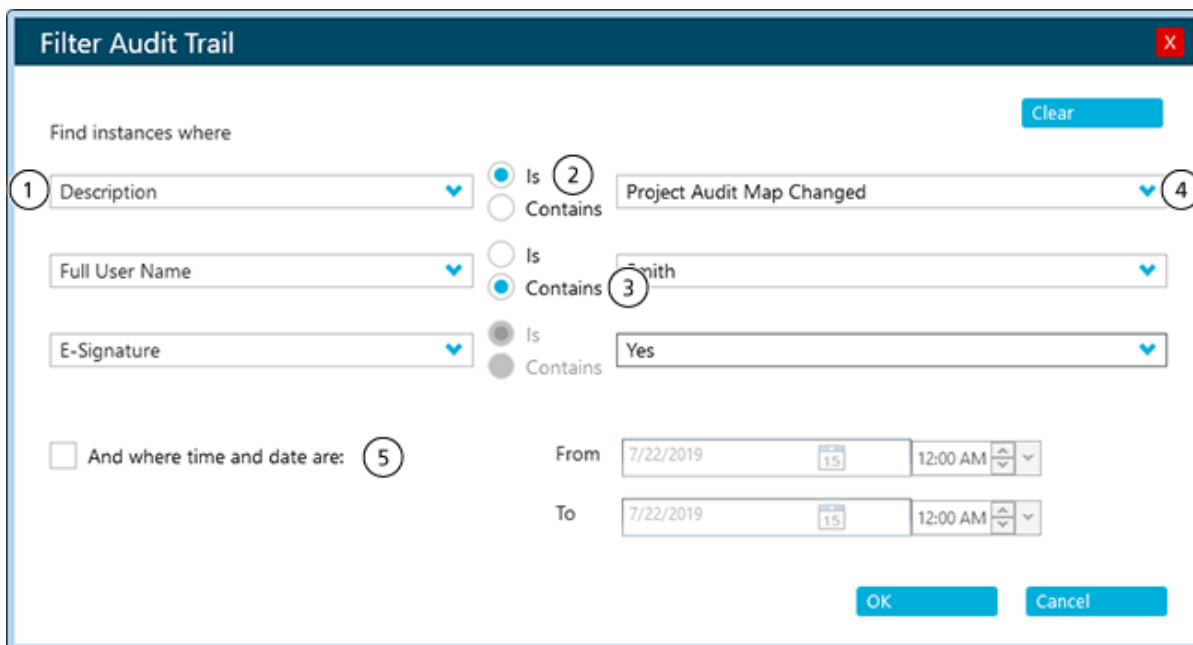
## Filtrer les événements audités à l'aide d'un ensemble de critères spécifiés

L'utilisateur peut filtrer les événements audités dans le journal d'audit avec un ensemble de critères spécifiés.

1. Ouvrez l'espace de travail Audit Trail.

2. Sélectionnez le registre d'audit à filtrer. Consulter la section : [Afficher les enregistrements du registre d'audit](#).  
Les enregistrements du registre d'audit s'affichent.
3. Cliquez sur **Filter** (  ).  
La boîte de dialogue Filter Audit Trail apparaît.
4. Utilisez les listes pour définir les critères de filtre requis.

**Illustration 8-1 : Filter Audit Trail Dialog**




Élément	Description
1	Dans la liste <b>&lt;No Filter&gt;</b> , sélectionnez le champ auquel le filtre doit être appliqué. Les champs suivants peuvent être filtrés : <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Description</b></li> <li>• <b>Sample Name</b></li> <li>• <b>Full User Name</b></li> <li>• <b>E-Signature</b></li> <li>• <b>Reason</b></li> </ul>
2	Sélectionnez pour filtrer selon un mot ou une expression exact(e).
3	Sélectionnez pour filtrer selon un mot ou une expression partiel(le).

## Audit

---

Élément	Description
4	Spécifier le texte à filtrer de la manière suivante : <ul style="list-style-type: none"><li>• Saisissez la chaîne de texte complète. Sélectionnez <b>Is</b> (2).</li><li>• Saisissez une chaîne de texte partielle. Sélectionnez <b>Contains</b> (3).</li><li>• Sélectionnez <b>Yes</b> ou <b>No</b>.</li></ul>
5	Utilisez pour filtrer selon des événements qui se sont produits à une date et une heure spécifiques.

5. Pour effacer le filtre, respectez les étapes suivantes :
  - a. Cliquez sur **Filter** ().
  - b. Cliquez sur **Clear** pour réinitialiser tous les critères de filtre sur **No Filter**.
  - c. Cliquez sur **OK**.

## Imprimer le registre d'audit

1. Ouvrez l'espace de travail Audit Trail.
2. Sélectionnez le registre d'audit à imprimer. Consulter la section : [Afficher les enregistrements du registre d'audit](#).
3. Cliquez sur **Print**.  
La boîte de dialogue Print s'ouvre.
4. Sélectionnez une imprimante et cliquez sur **Print**.



# Principes de fonctionnement - Logiciel

# A

Cette section décrit les concepts utilisés dans le logiciel.

## Manipulation des données

Le logiciel SCIEX OS nécessite un ordinateur fonctionnant avec le système d'exploitation Windows 7 64 bits ou Windows 10 64 bits. L'ordinateur et le logiciel du système associé fonctionnent avec le contrôleur système et le micrologiciel associé pour contrôler le système et l'acquisition de données. Pendant le fonctionnement du système, les données acquises sont envoyées au logiciel SCIEX OS pour être affichées sous forme de spectres de masse complets, d'intensités d'ions simples ou multiples par rapport au temps ou de courant ionique total par rapport au temps.

## Techniques de balayage

Ce système polyvalent et fiable est conçu pour la réalisation d'analyses de flux d'échantillons liquides par spectrométrie de masse et chromatographie en phase liquide dans le but de déterminer, quantifier et observer des composés.

Afin d'analyser les échantillons, le système utilise les techniques de spectrométrie de masse suivantes :

- Deux modes de spectrométrie de masse simple (MS) :
  - la spectrométrie de masse simple quadripolaire (calibration Q1 uniquement)
  - la spectrométrie de masse simple à temps de vol
- Un mode de spectrométrie de masse en tandem (MS/MS) :
  - la spectrométrie de masse avec analyse d'ions produits

## Vue de données différente

### Chromatogrammes

Un chromatogramme montre la variation d'une certaine quantité en fonction du temps au cours d'une expérience répétitive. Par exemple, quand l'instrument est programmé pour répéter à plusieurs reprises un ensemble donné de balayages spectraux des masses. Les données chromatographiques sont contiguës, même si l'intensité de la donnée est nulle. Les chromatogrammes ne sont pas générés directement par l'instrument, mais à partir des spectres de masse.

Dans le chromatogramme présenté sous forme de graphique, l'intensité, en taux de comptage par seconde (cps), est indiquée sur l'axe des Y par rapport au temps indiqué sur l'axe des X. Les pics sont automatiquement marqués.

## Principes de fonctionnement - Logiciel

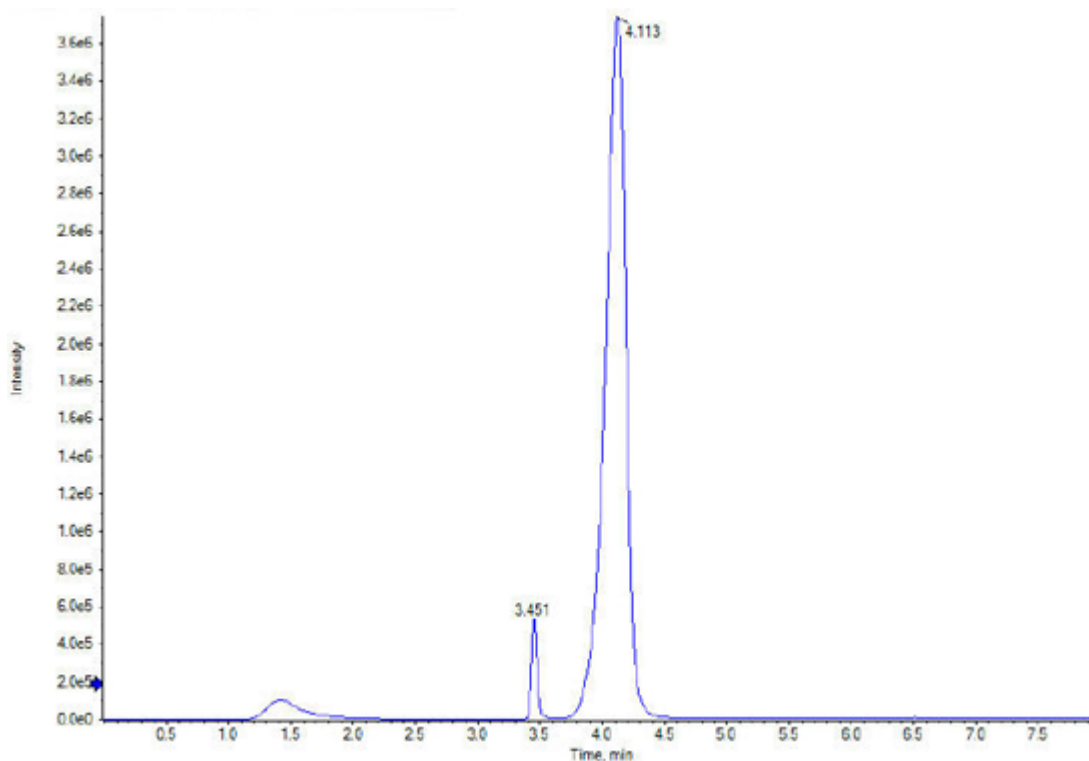
---

Le temps de rétention et l'intensité des pics chromatographiques peuvent changer en fonction des modifications des conditions chromatographiques pour un échantillon donné.

Les logiciels présentent les types de chromatogrammes suivants :

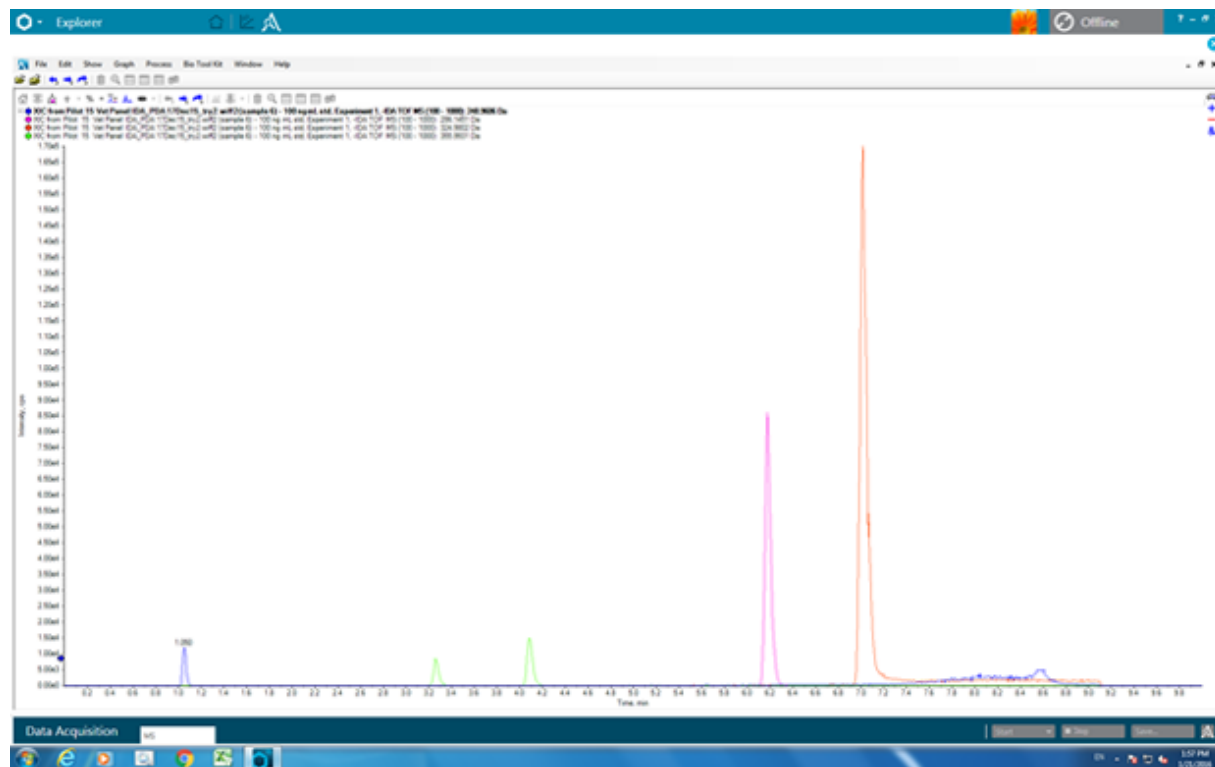
- **TIC** : tracé du courant ionique total en fonction du temps.

### Illustration A-1 : Exemple de TIC



- **XIC** : chromatogramme d'ions extraits créé en prenant les valeurs d'intensité à la valeur de la masse simple discrète ou une gamme de masses à partir d'une série de balayages spectraux des masses. Un XIC indique le comportement d'une masse donnée ou d'une plage de masses en fonction du temps.

## Illustration A-2 : Exemple de XIC



## Spectres

Un spectre désigne les données obtenues directement à partir du spectromètre de masse et représente normalement le nombre d'ions détectés avec des rapports masse/charge ( $m/z$ ) donnés. Il s'affiche sous forme de graphique avec les rapports  $m/z$  sur l'axe des abscisses et l'intensité (cps) représentée sur l'axe des ordonnées.

Lorsque les données sont visualisées sous forme de spectre, des informations spécifiques de la masse concernant un composé sont obtenues. Un spectre présente les valeurs  $m/z$  pour les ions correspondant à un pic chromatographique donné. Ces ions peuvent être utilisés pour trouver des informations plus spécifiques. Par exemple, un spectre illustre toutes les masses constituant un pic, notamment l'intensité de chaque masse.

L'intensité spectrale peut changer, mais la valeur  $m/z$  est fixe parce que la masse d'un composé ne varie pas.

Il existe deux façons de générer des données spectrales :

- Si un seul balayage est acquis, les données sont alors représentées sous forme d'un spectre.
- À partir d'un chromatogramme.

## Spectres de reconstruction

Un spectre traité est généré en appliquant un algorithme de déconvolution à un spectre MS ou MS/MS. Les spectres de reconstruction se composent de masses neutres ou de charge

nulle et de l'intensité correspondante. Le spectre fournit généralement les informations de poids moléculaire pour un composé. L'intensité spectrale pourrait changer, mais les informations de poids moléculaire ne changent pas.

Un spectre de reconstruction typique est affiché avec la masse (Da) sur l'axe X et l'intensité sur l'axe Y.

## Règles de décision

Pendant le traitement d'un lot dans l'espace de travail Queue, le logiciel peut réaliser certaines actions correctives en réponse à des résultats d'analyse spécifiés. Par exemple, si un échantillon ne respecte pas les critères d'acceptation définis dans la méthode de traitement (résultat d'analyse), le logiciel peut recevoir l'instruction de réinjecter l'échantillon (action corrective).

Cette fonctionnalité est mise en œuvre avec des règles de décision. Une règle de décision comporte deux parties principales :

- Une règle de signalisation, qui définit le résultat de l'analyse  
Les règles de signalisation sont dans les méthodes de traitement.
- Une action corrective, qui est appliquée si les résultats de traitement ne respectent pas les critères pour le résultat de l'analyse

Les actions correctives incluent les éléments suivants :

- Arrêt de la file d'attente
- Abandon du lot
- Injection d'un échantillon différent
- Réinjection du modèle signalé

Lors de la création d'un lot, l'utilisateur peut activer des règles de décision pour le lot, puis sélectionner les règles de décision à utiliser.

## Algorithme Dynamic Background Subtraction

L'algorithme Dynamic Background Subtraction améliore la détection des ions précurseurs dans une expérience IDA (acquisition dépendante de l'information). Lorsque l'algorithme est activé, l'IDA utilise un spectre dont le fond a été soustrait afin de sélectionner l'ion précurseur d'intérêt pour l'analyse MS/MS au lieu de sélectionner directement le précurseur à partir du spectre d'exploration. Comme ce processus a lieu pendant l'analyse LC, l'algorithme permet de détecter des espèces lorsque l'intensité de leur signal augmente. Ainsi, cet algorithme se concentre sur la détection et l'analyse des ions précurseurs sur la partie ascendante du pic LC, jusqu'à ou légèrement au-dessus du haut des pics LC.

## Analyse quantitative

L'analyse quantitative est utilisée pour trouver la concentration d'une substance particulière dans un échantillon. En analysant un échantillon inconnu et en le comparant à des échantillons standard, c'est-à-dire des échantillons contenant la même substance de

concentrations connues, le logiciel peut calculer la concentration de l'échantillon inconnu. Le processus implique la création d'une courbe d'étalonnage en utilisant la réponse du signal ou le ratio de réponse des standards puis en calculant les concentrations des échantillons inconnus. Les concentrations calculées de tous les échantillons sont ajoutées à un tableau de résultats.

L'analyse quantitative est le plus souvent réalisée avec une exploration de surveillance des réactions multiples (MRM). Dans une exploration MRM, un ion précurseur et un ion produit caractéristique sont utilisés pour définir une transition MRM hautement spécifique à l'analyte. La transition MRM, couplée au temps de rétention associé à l'analyte pendant la chromatographie liquide, fournit la spécificité nécessaire à la quantification.

La quantification est obtenue par l'utilisation de méthodes d'acquisition MRM LC-MS/MS validées, l'acquisition de courbes d'étalonnage et l'intégration ultérieure des pics associés aux composés concernés. La relation établie par la courbe d'étalonnage entre la réponse du signal et la concentration est utilisée pour déterminer la quantité d'un analyte particulier dans un échantillon inconnu.

### Ajout de standard

L'ajout de standard permet de déterminer la concentration d'un composé dans un échantillon dans lequel un effet de matrice connu évite d'utiliser une courbe d'étalonnage traditionnelle.

Cette fonction permet à l'utilisateur d'effectuer des calculs d'ajout de standard directement dans le logiciel. Si la fonction d'ajout de standard est activée dans le flux de travail de quantification, le calcul d'ajout de standard est effectué pendant l'intégration et les résultats sont affichés dans le tableau des résultats.

Si cette fonction est activée, les paramètres de régression suivants sont désactivés :

- Regression Type
- Weighting Type
- Automatic Outlier Removal

### Activer la fonction d'ajout de standard

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Cliquez sur **Process Method > New**.

---

**Conseil !** Pour modifier une méthode de traitement existante, cliquez sur **Process Method > Edit embedded method**, puis exécutez les étapes suivantes.

---

3. Sélectionnez la page Workflow, puis sélectionnez au moins un flux de travail et les échantillons de référence.
4. Sélectionnez la page Components, puis définissez les noms des composants, les masses, les standards internes, les groupes, etc.

**Conseil !** Si le groupe est défini dans le tableau Components, l'utilisateur peut choisir d'ajouter les ions dans le groupe, même si l'ion précurseur et l'indice expérimental sont différents pour les transitions. Les ions ajoutés ne sont pas affichés dans le tableau, mais sur la page Integration et dans le tableau de résultats sous la mention <group name>\_Sum. Cette fonction s'avère utile pour la quantification des protéines et des peptides.

---

**Conseil !** Lorsque le temps de rétention des composants n'est pas connu, définissez le **Retention Time Mode** pour une masse ou une formule chimique sur **Find  $n$  peaks**, où  $n$  est égal à 1, 2, 5, 10 ou tous. Le logiciel identifie le nombre spécifié de caractéristiques ayant la plus grande aire de pic, attribue le temps de rétention approprié, puis exécute un flux de travail de traitement de pic ciblé. Lorsque le traitement est terminé, la méthode intégrée du tableau de résultats peut être enregistrée en tant que méthode ciblée normale.

---

5. Sélectionnez la page Integration, puis sélectionnez les paramètres d'intégration pour chaque composant.
6. Cliquez sur **Options > Quantitate by standard addition**.

Cette fonction possède des exigences spécifiques pour les champs de lot suivants :

- **Sample ID:** Tous les échantillons appartenant au même groupe d'ajout de standard doivent avoir le même ID d'échantillon.
- **Sample Type:** Tous les échantillons à quantifier à l'aide de l'ajout de doivent avoir le même type d'échantillon, à savoir **Standard**.
- **Actual Concentration:** Ce champ doit contenir la concentration connue de standard ajoutée à chaque échantillon du groupe d'ajout de standard. Par exemple, pour les échantillons sans ajout de standard, la concentration est de **0**. Les données de cette colonne sont tracées comme axe des Y sur la courbe d'étalonnage.

Si cette fonction est activée, alors le tableau de résultats contient un nouveau champ **Standard Addition Accuracy** qui compare la **Standard Addition Calculated Concentration** d'un échantillon à la **Standard Addition Actual Concentration**.

Une vue dynamique de la courbe d'étalonnage pour un échantillon spécifique est fournie dans l'affichage Calibration Curve.

## Mass Reconstruction

Pour les grandes molécules, on observe généralement une diffusion de l'état de charge dans un spectre de balayage MS complet. La fonction de reconstruction de masse permet à l'utilisateur de réaliser une déconvolution de spectre directement dans le logiciel, puis de procéder à la quantification en fonction des pics de masse déconvolués ou de charge nulle. Si la fonction de reconstruction de masse est activée dans le processus de quantification, la détection de pics, la déconvolution des spectres, la détection de pics de masse et l'intégration sont réalisées pendant le traitement, et les résultats apparaissent dans la fenêtre Results Table.

## Activer la fonction Mass Reconstruction

---

**Remarque :** La fonction Mass Reconstruction n'est prise en charge que dans le protocole Quantitation.

---

**Remarque :** La fonction Mass Reconstruction n'est prise en charge que pour les algorithmes d'intégration MQ4 et Summation.

---

**Remarque :** Si la fonction Mass Reconstruction est activée, **Options > Sum Multiple Ion** est désactivé.

---

1. Ouvrez l'espace de travail Analytics.
2. Cliquez sur **Process Method > New**.

---

**Conseil !** Pour modifier une méthode de traitement existante, cliquez sur **Process Method > Edit embedded method**, puis exécutez les étapes suivantes.

---

3. Sélectionnez la page Workflow, puis sélectionnez le flux de travail **Quantitation** et les échantillons de référence.
4. Sélectionnez la page Components.
5. Cliquez sur **Options > Mass Reconstruction**.
6. Ajoutez les composants, en saisissant des informations dans les champs requis.

---

**Remarque :** Le champ **Expected MW** est facultatif.

---

7. Cliquez sur **Integration** pour afficher la page d'intégration et contrôlez le chromatographe XIC, le spectre moyen et le spectre de reconstruction, puis sélectionnez la masse cible.
8. Enregistrez la méthode.

Si cette fonction est activée, le Results Table contient les nouvelles colonnes suivantes : **Expected MW, MW, MW Delta (Da), MW Delta (ppm), IS Expected MW, IS MW, IS MW Delta (Da)** et **IS MW Delta (ppm)**.

## Analyse qualitative

L'analyse qualitative permet d'identifier un composé cible ou inconnu. En spectrométrie de masse, la détermination des composés présents est obtenue par l'utilisation de la précision de la masse, du temps de rétention, du modèle isotopique, de la recherche dans la bibliothèque et des résultats de recherche. L'utilisation de tous ces outils peut augmenter la possibilité d'identifier les composés ciblés et non ciblés dans des échantillons inconnus.

## Précision de masse

Lorsque vous tentez d'identifier un composé cible connu dans un échantillon, il est utile de rechercher la précision de masse de ce composé et de déterminer si une correspondance possible pour ce composé présente une précision de masse située dans une certaine

tolérance. Par exemple, l'imazalil a pour formule chimique  $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$ , ce qui donne une masse monoisotopique à quatre décimales de 296,0483. Un adduit protoné est un ion présentant une charge positive, en général détectée à l'aide d'un spectromètre de masse. L'adduit protoné de l'imazalil présente un rapport masse sur charge ( $m/z$ ) de 297,0556. Si on pense que l'imazalil est présent dans l'échantillon, comparez la  $m/z$  du composé trouvé à la  $m/z$  de l'imazalil protoné et déterminez leur niveau de correspondance. Plus la différence est faible, en ppm ou en Da, plus il est probable que le composé trouvé corresponde.

## Temps de rétention

La plupart des spectromètres de masse utilisent un type de chromatographie. Le temps de rétention pour un composé est déterminé par l'injection d'un standard connu du composé. Le temps de rétention peut être utilisé pour faciliter l'identification des composés cibles dans un échantillon. Si le composé suspecté est présent dans un échantillon inconnu, plus le temps de rétention est proche du temps de rétention du standard, plus la probabilité de pouvoir identifier le composé inconnu est forte. Les temps de rétention peuvent changer et doivent être confirmés régulièrement à l'aide d'un standard connu.

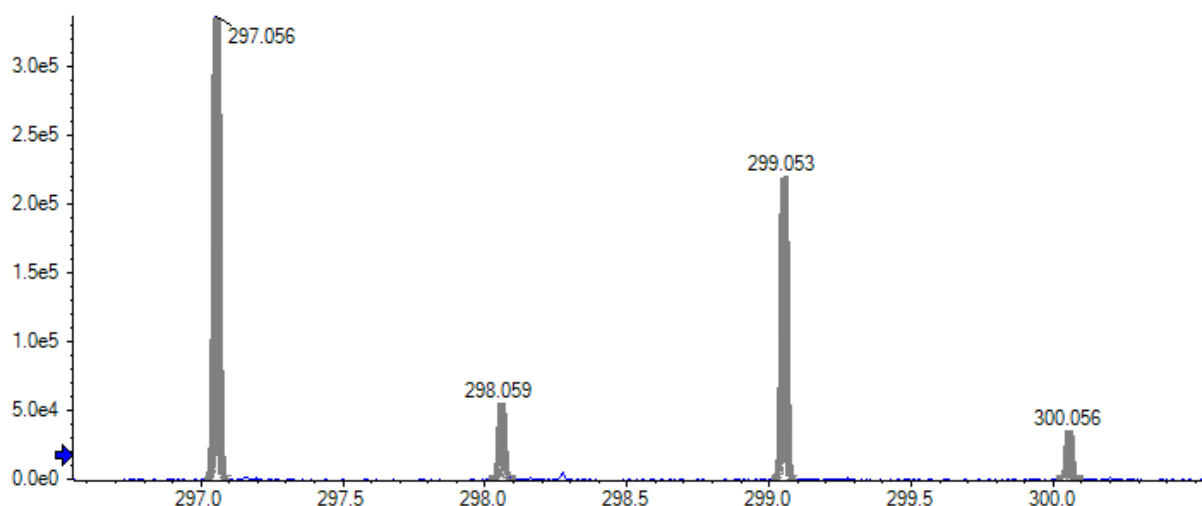
## Modèle isotopique

Le spectre de masse d'un balayage complet réalisé à partir d'un composé dans un spectromètre de masse présente un modèle isotopique distinct basé sur la formule moléculaire utilisée.

Pour le modèle isotopique pour l'imazalil, consultez la figure suivante.

### Illustration A-3 : Modèle isotopique (Imazilil)

●  $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O + H$



Ce modèle isotopique de l'imazalil est constitué des différents isotopes de masse des éléments. Dans un premier temps, un calcul théorique du modèle isotopique est effectué. Ce modèle est ensuite comparé à ce qui a été effectivement acquis, en réalité, pour l'échantillon. Plus la correspondance est forte entre le modèle isotopique théorique et le modèle réel, plus la probabilité est forte que le composé ait été identifié.



## Recherche dans la bibliothèque

La comparaison de spectres acquis MS/MS, réalisés à partir d'échantillons inconnus, à une base de données de composés avec spectres de référence constitue l'un des outils les plus puissants de l'analyse qualitative. Les algorithmes de recherche dans la bibliothèque comparent les spectres inconnus de l'échantillon, puis tentent de mettre en évidence une correspondance entre ces spectres et les composés et spectres connus de la base de données. Plus la correspondance est forte et le score rapporté élevé, plus le composé est susceptible d'avoir été identifié.

La pureté, l'adaptation et l'adaptation inversée sont calculées comme suit :

- S'il existe un pic à une masse donnée à la fois dans le spectre présent dans la bibliothèque (réduit) et dans le spectre inconnu (réduit), dont le rapport d'intensité se situe dans les limites spécifiées par l'utilisateur, l'intensité du pic dans le spectre de la bibliothèque est définie comme étant égale à celle du spectre inconnu.

- La pureté est calculée comme suit :

$100,0 (UL_{total})^2 / (U_{total} \cdot L_{total})$  où:

$$U_{total} = \sum U_m \cdot U_m$$

$$L_{total} = \sum L_m \cdot L_m$$

$$UL_{total} = \sum U_m \cdot L_m$$

Les sommes incluent toutes les masses où les intensités  $U_m$  et  $L_m$  sont les racines carrées de la valeur pondérée en fonction de la masse, qui est réduite ; inconnues ; et des entrées de bibliothèque. La pureté se situera forcément dans la plage située entre les valeurs 0 et 100, et est une mesure de la similarité existant entre le spectre présent dans la bibliothèque et le spectre inconnu.

- L'adaptation est calculée exactement comme la pureté, si ce n'est que seules les masses présentes dans le spectre de la bibliothèque sont incluses dans les sommes. Cela n'a aucun effet sur  $L_{total}$  ou  $UL_{total}$  car aucun terme n'est supprimé de ces sommes. L'adaptation évalue dans quelle mesure le spectre de la bibliothèque est contenu dans le spectre inconnu. Une adaptation élevée et une pureté faible révèlent que le spectre inconnu est probablement impur, mais qu'il contient le composé de la bibliothèque.
- L'adaptation inversée est également calculée comme la pureté, si ce n'est que seules les masses présentes dans le spectre inconnu sont incluses dans les sommes. L'adaptation inversée évalue dans quelle mesure le spectre inconnu est contenu dans le spectre de la bibliothèque.

## Recherche de formules

À l'aide d'un nombre de masse, l'algorithme Formula Finding tente de prédire la formule chimique du composé en fonction des spectres MS et MS/MS générés par un spectromètre de masse. Un score Formula Finding élevé ne signifie pas nécessairement que le composé dans l'échantillon est celui qui a été identifié par l'algorithme Formula Finding, car plusieurs formules correspondent souvent à l'erreur de masse. Il faut donc procéder avec prudence.

## Principes de fonctionnement - Logiciel

---

D'autres tests de confirmation doivent être effectués avant qu'un composé ne soit identifié via Formula Finding.

---

**Remarque** : Il n'est pas recommandé de procéder à la recherche de formules avec des systèmes de masse nominale.

---

L'algorithme Formula Finding utilise les réglages de seuils de signalisation pour l'exactitude de la masse. Une erreur de ppm rouge reçoit un score de 0 et une correspondance parfaite reçoit un score de 100.

Le spectre MS contribue à 67 % au score Formula Finding final et le spectre MS/MS contribue à 33 %. La capacité de la formule à prédire la masse MS est donc l'influence principale du score. La correspondance des fragments MS/MS influence toutefois également le score.

Le modèle d'isotope est utilisé pour générer la liste de formules trouvées, mais pas pour générer le score final. Une formule avec le mauvais modèle d'isotope ne sera probablement pas incluse dans la liste.

Une liste des formules possibles est déterminée à l'aide de la précision de masse de l'ion précurseur, du modèle isotopique et de la fragmentation MS/MS. Les formules proposées sont notées, basées sur la précision de masse de l'ion précurseur et la précision de masse MS/MS moyenne des fragments concordants.

## Intégration

Dans les analyses quantitatives ou qualitatives, l'intégration fait référence à la génération des surfaces ou amplitudes de pics chromatographiques pour les composés étudiés. Une méthode de traitement contient toutes les informations nécessaires pour traiter les données.

La compilation des informations quantitatives ou qualitatives pour un ensemble donné d'échantillons est appelée tableau de résultats. Voir [Tableaux de résultats](#).

Le logiciel compte trois algorithmes d'intégration qui peuvent être utilisés :

- MQ4 : sélectionne par défaut un standard ou un échantillon de contrôle qualité de concentration faible, mais pas de la concentration la plus faible, comme échantillon représentatif de la série analytique.
- AutoPeak : sélectionne par défaut un standard ou un échantillon de contrôle qualité de concentration élevée, mais pas saturée, comme échantillon représentatif de la série analytique.
- Summation : ne réalise pas de recherche de pic normale, mais considère qu'un pic est présent près de la durée de rétention attendue.

Il est également possible d'intégrer manuellement les pics qui ont été omis par les algorithmes.

## Paramètres de l'algorithme d'intégration AutoPeak

Les paramètres suivants servent à identifier et à rapporter le pic d'intérêt.

Vous trouverez une liste complète des paramètres disponibles dans le système d'aide.

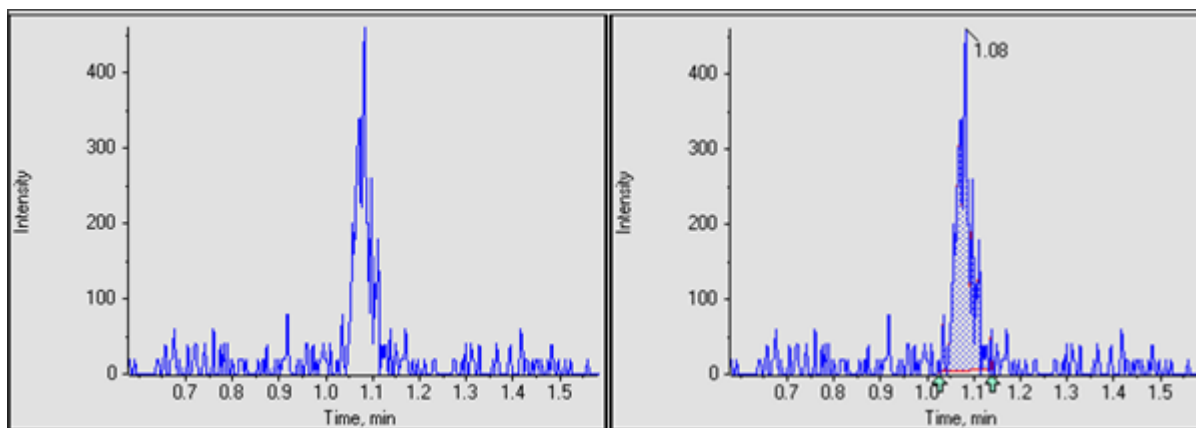
- **Local peak baseline** : Le logiciel évalue les modifications dans la référence localement autour du pic par opposition au calcul de la référence par rapport à l'intégralité du chromatogramme.
- **Linear peak baseline** : Le logiciel adapte une ligne entre les points au début et à la fin de ce groupe spécifique de pics par opposition à la possibilité d'obtenir une référence non linéaire sous le pic.

**Saturation correction** : Lorsque l'algorithme détecte qu'un pic est saturé, il utilise le modèle pour prédire à quoi pourrait ressembler le pic si le détecteur n'était pas saturé. Le profil s'étend alors au-dessus du sommet du pic pour se rapprocher de la réponse qui aurait été obtenue. Ceci peut étendre la plage dynamique linéaire des courbes d'étalonnage. Cette option est disponible uniquement lors de la définition des valeurs globales par défaut de l'algorithme, et non durant la création de la méthode de traitement ou l'examen de chaque pic, car il n'est pas utile d'utiliser ce paramètre pour seulement quelques pics.

### Minimum Signal/Noise

Si le rapport signal/bruit minimum est défini sur sept, comme illustré dans le graphique de gauche de la figure suivante, le pic n'est pas rapporté. Si le rapport signal/bruit minimum est défini sur deux, comme illustré dans le graphique de droite, le pic est rapporté. Ce paramètre n'affecte pas l'intégration.

Illustration A-4 : S/N Threshold



### Confidence Threshold

Ce paramètre permet de filtrer les pics potentiels qui sont de faux positifs. La valeur par défaut est de 50 %, ce qui convient généralement. L'utilisateur pourrait toutefois vouloir utiliser une valeur plus élevée pour les données très bruyantes ou pour celles pour lesquelles la largeur de pic présente une variation considérable d'un échantillon à l'autre.

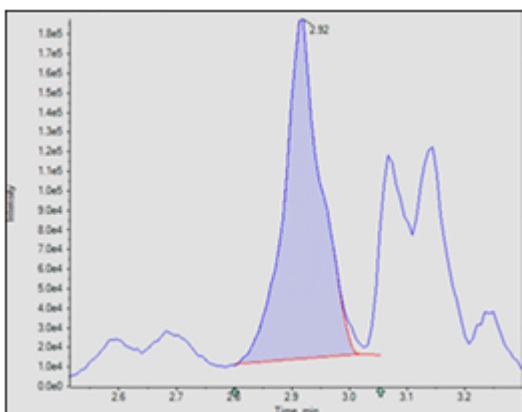
Les deux figures suivantes illustrent la manière dont le **Confidence Threshold** affecte le nombre de pics identifiés. Si **Confidence Threshold** est défini sur 50 %, le pic qui présente une petite épaule est identifié comme un seul pic. Si **Confidence Threshold** est ramené à 16 %, l'algorithme SignalFinder trouve deux pics. Faire glisser les deux régions de pic pour visualiser les deux pics.

## Principes de fonctionnement - Logiciel

---

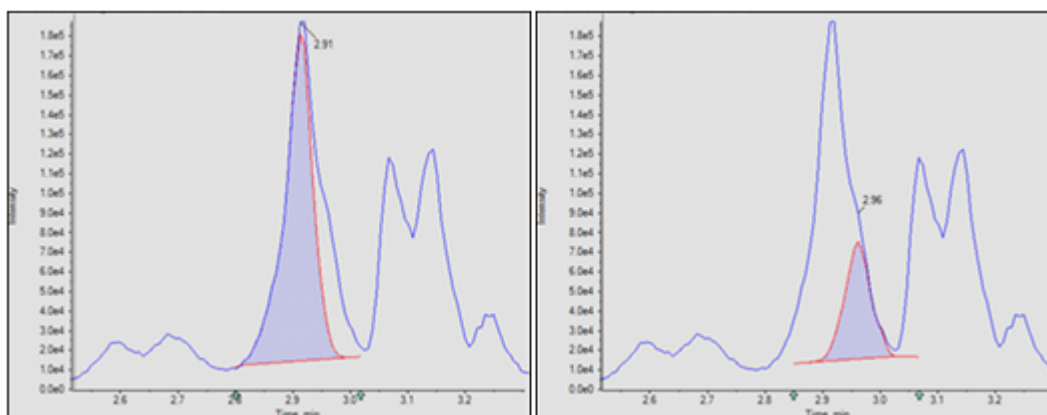
Pour déterminer quels autres pics sont potentiellement présents dans ce pic et si la valeur **Confidence Threshold** correcte n'est pas connue, appuyer sur **Ctrl**, puis faire alors glisser sur la région d'intérêt du pic. Cela abaisse automatiquement le **Confidence Threshold** pour révéler le deuxième pic d'intérêt qui n'est pas présent lorsque le **Confidence Threshold** est défini sur 50 %.

### Illustration A-5 : Confiance à 50 %

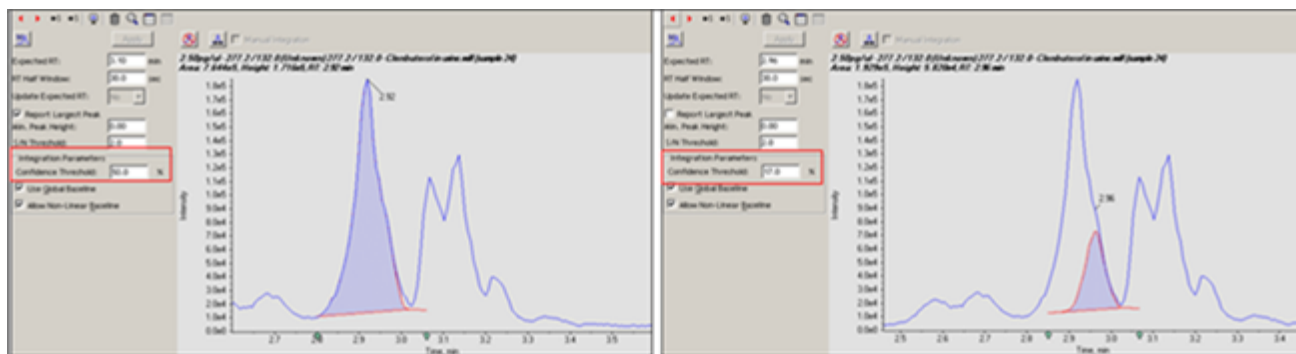


Avec une confiance de 16 %, deux pics sont trouvés. Faire glisser la zone de pic pour identifier les deux pics.

### Illustration A-6 : Confiance à 16%



### Illustration A-7 : Paramètre Confidence Threshold

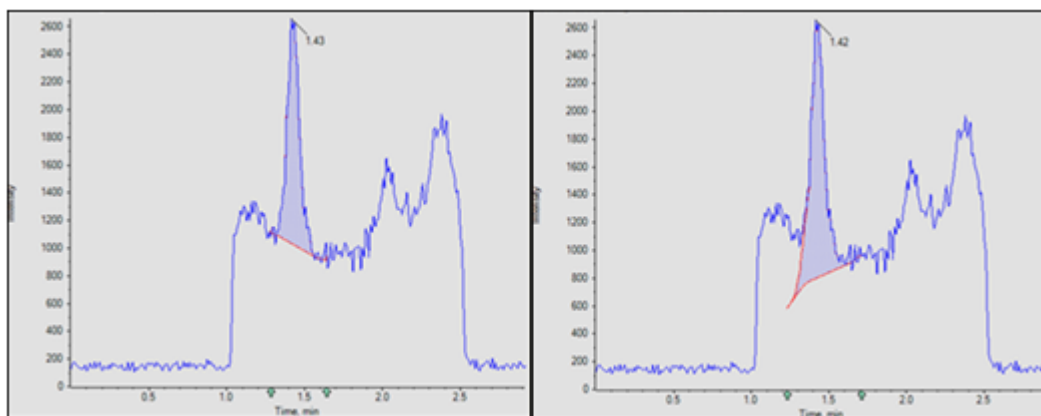


### Références de pics locales ou globales

La référence des pics peut être locale ou globale. Si l'option locale est sélectionnée, le logiciel de quantification évalue alors les modifications apportées à la référence localement. L'option globale utilise le chromatogramme entier comme référence.

Pour un exemple indiquant quand utiliser la référence locale, voir la figure suivante. Le graphique de gauche présente un chromatogramme ayant été correctement intégré au moyen de la référence locale. Le graphique de droite montre le même chromatogramme qui a été mal intégré au moyen de la référence globale.

### Illustration A-8 : Use Global Baseline

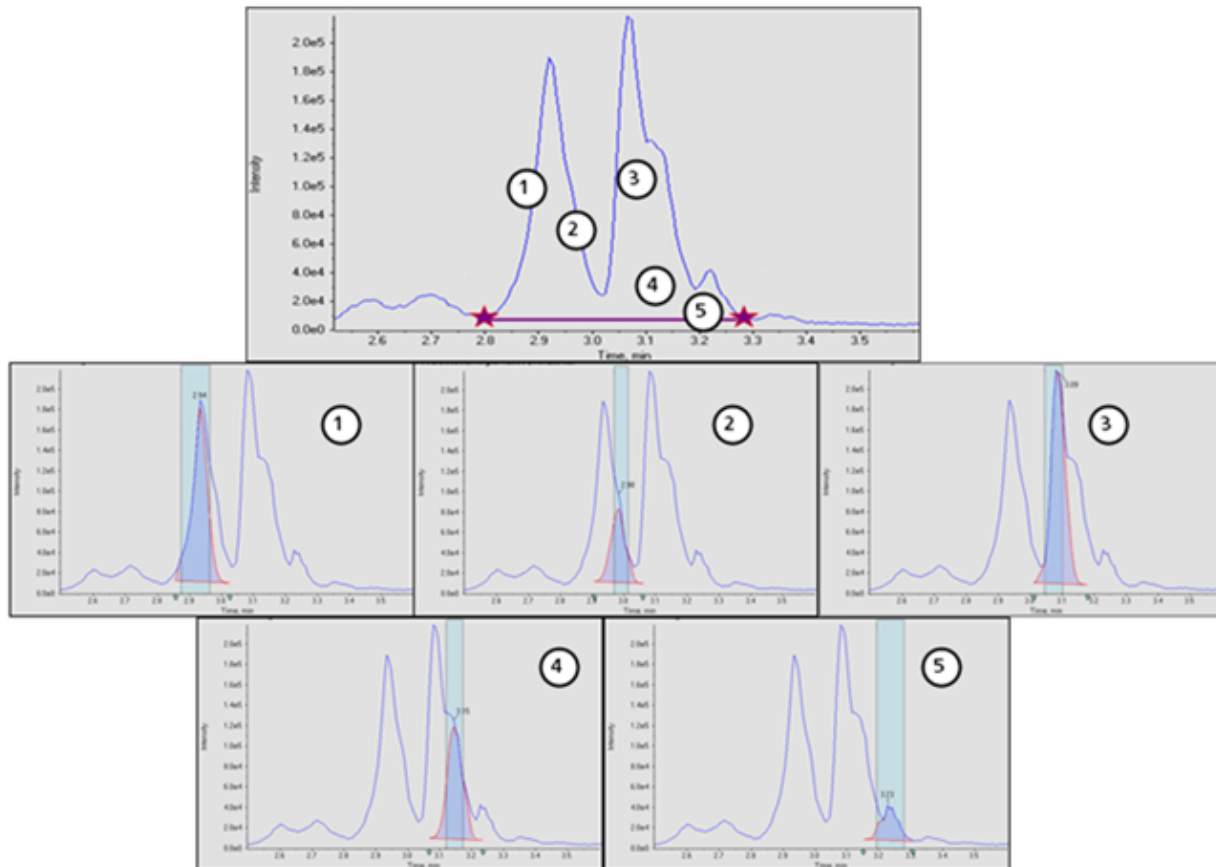


### Références de pics linéaires ou non linéaires

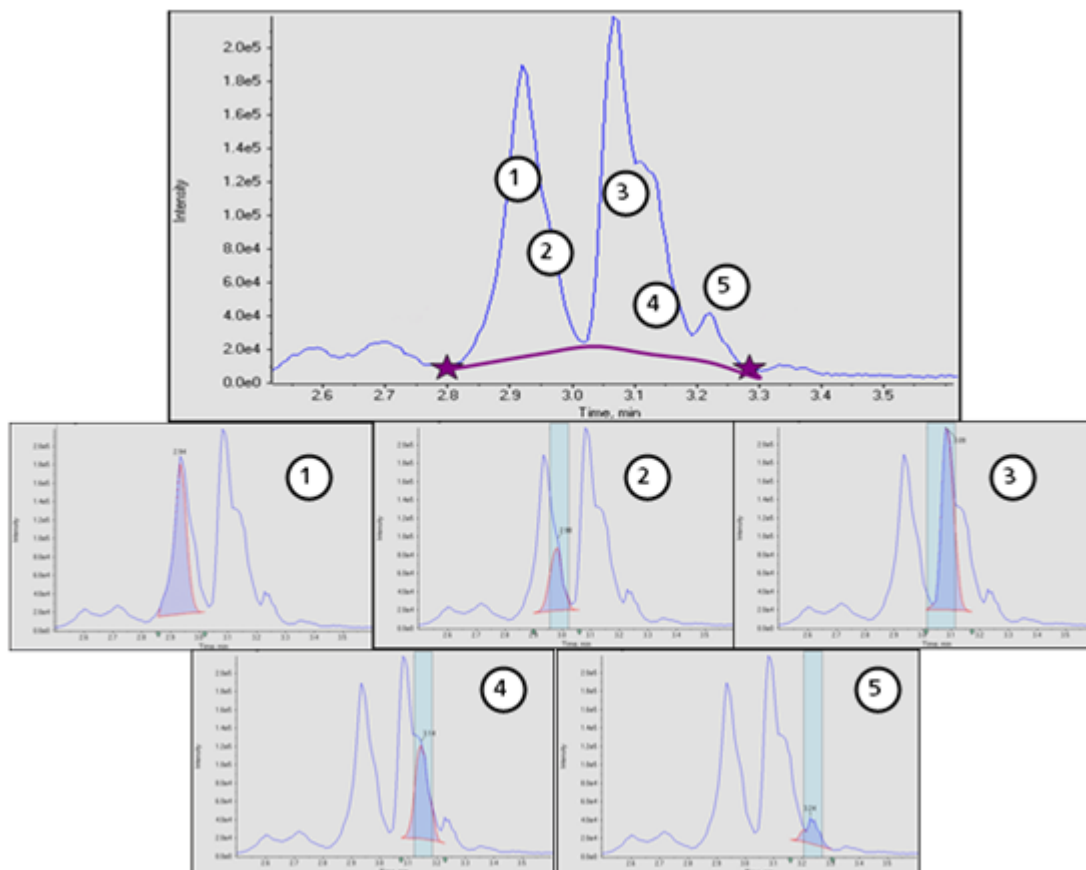
La référence des pics peut être définie sur linéaire ou non linéaire. L'option non linéaire estime la référence sous chaque pic. L'option linéaire intègre une ligne entre les points au début et à la fin de ce groupe spécifique de pics. Pour des exemples de références linéaires et non linéaires pour les pics de co-élution, voir [Illustration A-9](#) et [Illustration A-10](#). Les éléments 1 à 4 sont des pics convolués. La légende 5 représente la référence, dérivée avec les différentes options.

Une référence non linéaire est recommandée pour plusieurs pics. Pour un pic unique, la différence entre la référence linéaire et la référence non linéaire est insignifiante.

Illustration A-9 : Exemple de référence linéaire



## Illustration A-10 : Exemple de référence non linéaire



## Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4

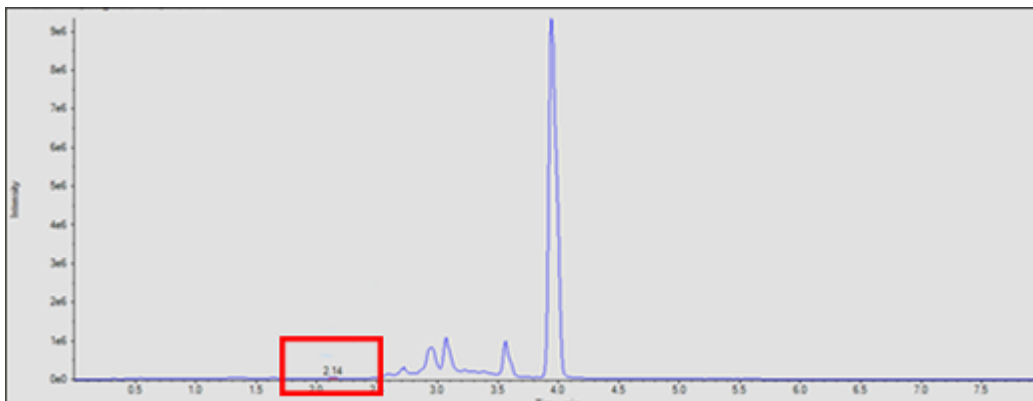
Les paramètres suivants servent à identifier et à rapporter le pic d'intérêt. Vous trouverez une liste complète des paramètres disponibles dans le système d'aide.

### Pourcentage de bruit

Ce paramètre permet d'estimer le niveau de bruit dans les chromatogrammes. Le pourcentage spécifié de points de données présentant la plus petite intensité est considéré comme étant du bruit.

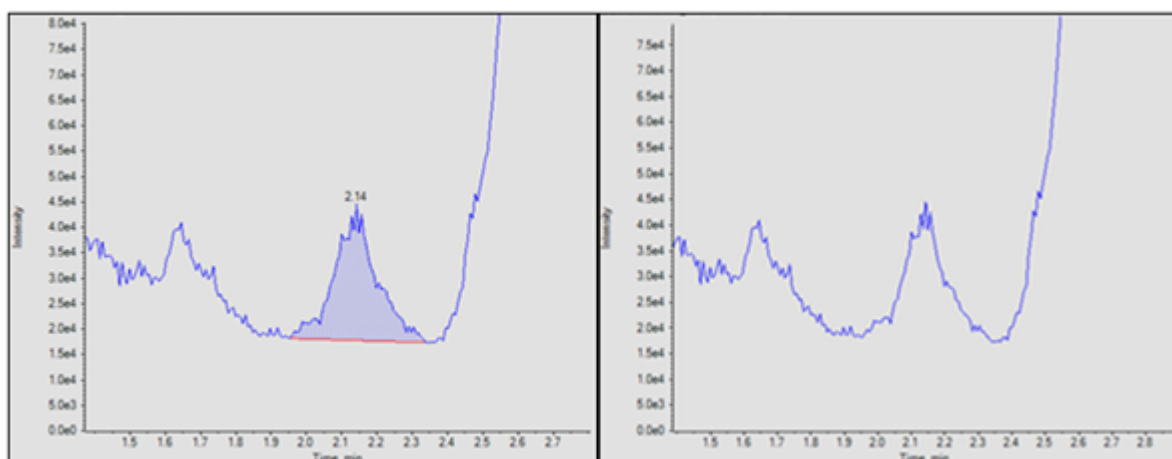
Les valeurs typiques se situent entre 20 et 60 %. Si des petits pics ne sont pas trouvés en présence de pics plus grands, le pourcentage de bruit doit alors être abaissé. La figure suivante présente un exemple d'un petit pic en présence d'un pic extrêmement grand. Ce pic n'est pas trouvé lorsque le pourcentage de bruit est défini sur 90 %, mais il l'est lorsque le pourcentage de bruit est défini sur 40 %.

### Illustration A-11 : Pic d'intérêt



Sur la figure suivante, le graphique de gauche représente le pourcentage de bruit défini sur 40 %. Le graphique de droite est défini sur 90 %.

### Illustration A-12 : Niveaux de bruit



## Baseline Subtract Window

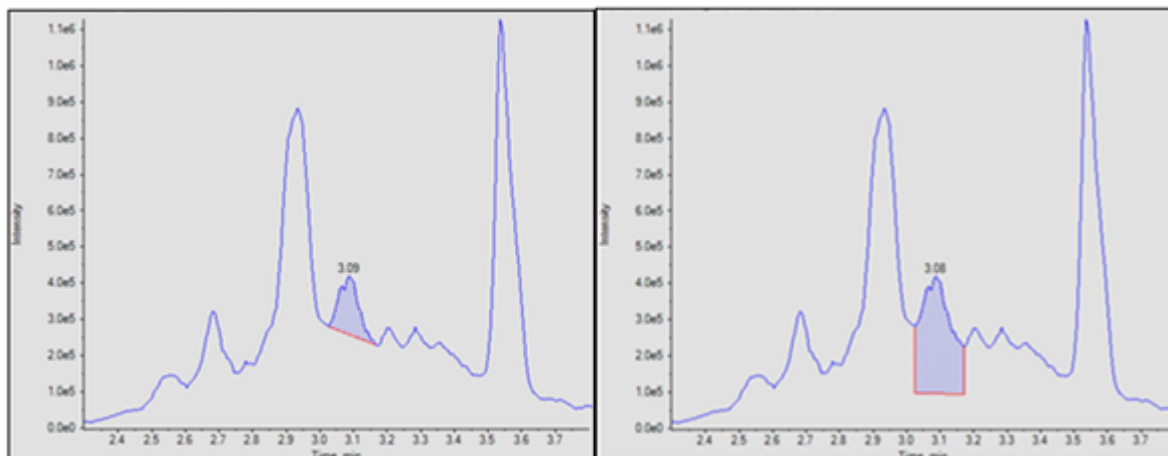
Après le lissage, mais avant tout autre traitement, les chromatogrammes sont soustraits de la référence afin d'éliminer les irrégularités dans les données. Pour chaque point de données, la référence est calculée à l'aide des points de données situés à gauche et à droite du point en cours et présentant une intensité minimale, dans la fenêtre de soustraction.

La valeur exacte de ce paramètre n'est pas essentielle, sous réserve qu'elle soit au moins plusieurs fois supérieure à la largeur de pic attendue.

Dans la figure suivante, le graphique de gauche représente la fenêtre de soustraction de référence définie sur 0,1 minute et le graphique de droite représente la fenêtre de soustraction de référence définie sur 1 minute.



Illustration A-13 : Fenêtre Baseline Subtraction



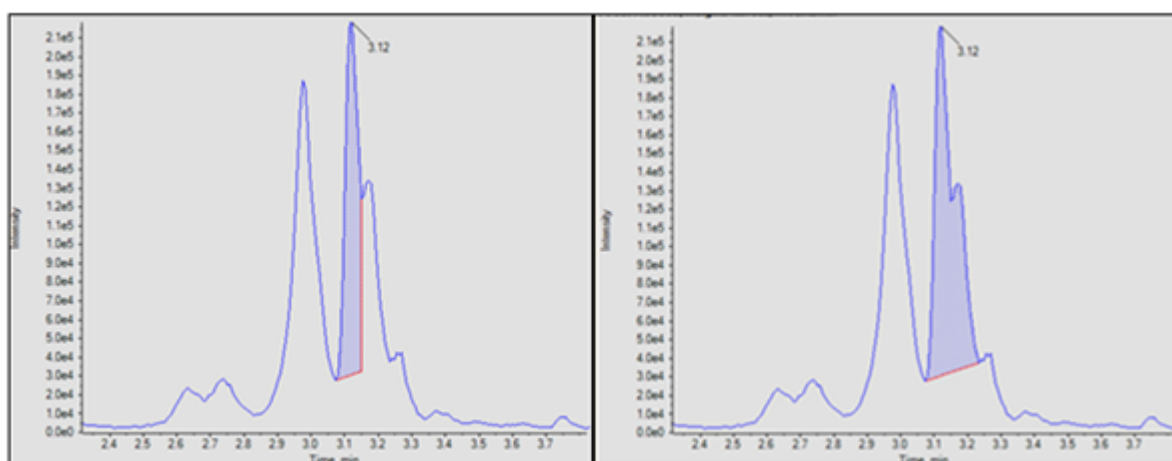
## Division des pics

Ce paramètre détermine si un pic potentiellement bruyant est identifié comme un seul pic ou comme deux pics distincts, voire plus. Si le creux entre deux pics potentiels est inférieur à la valeur spécifiée, un seul pic est alors trouvé. Dans le cas contraire, deux pics sont trouvés.

Le réglage de ce paramètre sur une valeur élevée évite aux pics bruyants d'être divisés et considérés comme deux pics distincts. Toutefois, il convient d'utiliser une valeur plus basse si deux pics distincts sont en élution (se chevauchent).

Sur la figure suivante, le graphique de gauche affiche Peak Splitting défini sur deux points. Le graphique de droite représente Peak Splitting défini sur trois points.

Illustration A-14 : Division des pics



## Régression

L'aire ou l'amplitude des pics d'analyte est reportée en fonction des concentrations connues sur la courbe d'étalonnage et le tracé métrique. Ultérieurement, une droite est ajustée à ces

points. Cette droite de régression est utilisée pour calculer la concentration des échantillons inconnus.

## Équations de régression

Cette section décrit les équations utilisées pour calculer les courbes de régression. Dans les équations suivantes,  $x$  représente la concentration de l'analyte pour les échantillons standard et  $y$  représente l'aire ou l'amplitude de pic correspondante. Les variables exactes utilisées pour la régression dépendent de l'utilisation ou non d'une standard interne et de l'utilisation de l'aire ou de l'amplitude du pic, comme illustré dans le tableau suivant.

**Tableau A-1 : Variables de régression**

Étalon interne utilisé ?	Surface utilisée ?	x	y
Oui	Oui	$C_a / C_{est} / DF$	$A_a / A_{est}$
Oui	Non	$C_a / C_{est} / DF$	$H_a / H_{est}$
Non	Oui	$C_a / DF$	$A_a$
Non	Non	$C_a / DF$	$H_a$

où :

- $C_a$  = concentration réelle en analyte
- $C_{est}$  = concentration du standard interne
- DF = facteur de dilution
- $A_a$  = aire du pic de l'analyte
- $A_{est}$  = aire du pic du standard interne
- $H_a$  = amplitude du pic de l'analyte
- $H_{est}$  = amplitude du pic du standard interne

## Types de pondération

Le tableau suivant montre comment le facteur de pondération ( $w$ ) est calculé pour chacun des sept types de pondération.

**Tableau A-2 : Types de pondération**

Weighting Type	Poids (w)
Aucune	Toujours 1.0.
$1 / x$	Si $ x  < 10^{-5}$ , alors $w = 10^5$ . Sinon, $w = 1 /  x $ .
$1 / x^2$	Si $ x  < 10^{-5}$ , alors $w = 10^{10}$ . Sinon, $w = 1 / x^2$ .
$1 / y$	Si $ y  < 10^{-8}$ , alors $w = 10^8$ . Sinon, $w = 1 /  y $ .
$1 / y^2$	Si $ y  < 10^{-8}$ , alors $w = 10^{16}$ . Sinon, $w = 1 / y^2$ .

Tableau A-2 : Types de pondération (suite)

Weighting Type	Poids (w)
ln (x)	Si $x < 0$ , alors une erreur est générée. Si $x < 10^{-5}$ , alors $w = \ln 10^5$ . Sinon $w =  \ln (x) $ .
ln (y)	Si $y < 0$ , alors une erreur est générée. Si $y < 10^{-8}$ , alors $w = \ln 10^8$ . Sinon $w =  \ln (y) $ .

## Coefficient de corrélation

Dans les équations de régression,  $x$ ,  $y$  et  $w$  sont tels que définis précédemment. Toutes les sommes sont calculées sur l'ensemble des échantillons standard, à l'exception des échantillons standard marqués comme non utilisés.

Le coefficient de correction est calculé comme suit :

où :

$$D_y = \sum w \sum wy^2 - (\sum wy)^2$$

- $y_c$  = valeur Y calculée à l'aide de l'équation adaptée au type de régression

$$D_{y_c} = \sum w \sum wy_c^2 - (\sum wy_c)^2$$

## Types de régression

Dans l'espace de travail Analytics, les types de régression suivants sont disponibles :

- Moyenne (volet Metric Plot uniquement)
- Médiane (volet Metric Plot uniquement)
- Linéaire ( $y = mx + b$ )
- Linéaire passant par zéro ( $y = mx$ )
- Facteur de réponse moyen
- Quadratique ( $y = a^2 + bx + c$ )
- Puissance
- Wagner
- Hill

**Remarque** : L'option **Remove outliers automatically from the calibration curve** dans la boîte de dialogue Regression Options du volet Calibration Curve applique automatiquement les règles de retrait automatique des données aberrantes aux composants d'intérêt sélectionnés. Consultez l'Aide.

### Linear

L'équation d'étalonnage linéaire est la suivante :

$$y = mx + b$$

La pente et l'interception sont calculées comme suit :

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

où :

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

### Linéaire passant par l'origine

L'équation d'étalonnage linéaire passant par l'origine est la suivante :

$$y = mx$$

La pente est calculée comme suit :

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

### Facteur de réponse moyen

L'étalonnage avec le facteur de réponse moyen est le suivant :

$$y = mx$$

Il s'agit de la même équation que dans le cas de l'étalonnage linéaire passant par l'origine. Cependant, la pente est calculée de façon différente comme suit :

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

L'écart-type du facteur de réponse est calculé comme suit :

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

où :

$$D = \sum w \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

---

**Remarque :** Les points ayant zéro pour valeur x sont exclus des sommes.

---

Si la ligne de points présente certaines zones linéaires et certaines zones courbes, utilisez alors la régression de puissance plutôt que la régression linéaire ou la régression quadratique pour obtenir une ligne quelque part entre ces ajustements.

## Quadratique

L'équation d'étalonnage quadratique est la suivante :

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Les coefficients polynomiaux sont calculés comme suit :

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

où :

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

## Puissance

L'équation d'étalonnage de la fonction de puissance est la suivante :

$$y = ax^p$$

Les équations d'étalonnage linéaire sont utilisées comme décrit ci-dessus pour calculer la pente (m) et l'ordonnée (b), excepté que dans ces équations, x est remplacé par ln x et y est remplacé par ln y. Une fois cela effectué, a et p sont calculés comme suit :

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Si l'une des valeurs x- ou y- est négative ou est égale à zéro, une erreur est alors communiquée.

### Wagner

L'équation d'étalonnage de Wagner est la suivante :

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Les équations pour l'étalonnage quadratique sont utilisées comme indiqué ci-dessus pour calculer  $a_0$ ,  $a_1$ , et  $a_2$ , excepté que dans ces équations,  $x$  est remplacé par  $\ln x$  et  $y$  par  $\ln y$ .

Si l'une des valeurs  $x$ - ou  $y$ - est négative ou est égale à zéro, une erreur est alors communiquée.

### Hill

L'équation d'étalonnage de Hill est la suivante :

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

Il n'est pas possible de fournir une fonction analytique pour calculer  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $n$ . Au lieu de cela, les coefficients sont déterminés selon la méthode itérative de Levenberg-Marquardt.

## Suppression automatique des données aberrantes

Une fonction facultative permet au logiciel de supprimer automatiquement les données aberrantes de la courbe d'étalonnage. Cette fonction utile permet de gagner du temps dans les applications avec de nombreux composés présentant des plages et des sensibilités différentes.

Lorsqu'elle est activée, le logiciel étudie de manière itérative tous les points de données pour identifier une plage de départ composée de quatre points consécutifs qui fournit la meilleure régression linéaire et satisfait les règles définies par l'utilisateur pour la suppression des données aberrantes. L'algorithme calcule plusieurs régressions pour toutes les permutations des points de départ. Il envisage toutes les régressions valides qui respectent les règles définies par l'utilisateur et les examine toutes à travers la séquence d'expansion. Pour toutes les plages de départ valides, la réussite de chaque expansion dépend du nombre total de points utilisés, de la plage des niveaux utilisés et du point présentant la pire erreur de précision absolue dans la régression avant et après l'expansion. La régression qui couvre la plage la plus large et satisfait les règles est la régression « gagnante ».

---

**Remarque :** Si l'algorithme ne trouve pas quatre points de données, le logiciel en utilise trois. L'algorithme ne sera pas appliqué si moins de trois points sont disponibles.

---

Les règles de suppression automatique des données aberrantes sont définies dans la méthode de traitement et comprennent les éléments suivants :

- Coefficient de corrélation minimal ( $r$ )

---

**Remarque :** Cette option utilise le coefficient de corrélation et pas le coefficient de détermination ( $r^2$ ).

---

- Erreur de précision maximale autorisée pour les réplicats standard à la limite inférieure de quantification (LLOQ)
- Erreur de précision maximale autorisée pour les standards supérieurs à la LLOQ
- Coefficient de variation (CV) maximal en pourcentage pour plusieurs réplicats d'un standard à la LLOQ

---

**Remarque** : Si le %CV est supérieur à la valeur spécifiée, l'algorithme supprime les réplicats dans l'ordre décroissant d'erreur de précision jusqu'à ce que le %CV des réplicats restants soit inférieur à cette valeur.

---

- CV maximal en pourcentage pour plusieurs réplicats d'un standard à tous les niveaux supérieurs à la LLOQ

---

**Remarque** : Si le %CV est supérieur à la valeur spécifiée, l'algorithme supprime les réplicats dans l'ordre décroissant d'erreur de précision jusqu'à ce que le %CV des réplicats restants soit inférieur à cette valeur.

---

- Si le nombre total de données aberrantes spécifié exclut les données inférieures à la LLOQ et la limite supérieure de quantification (ULOQ)
- Nombre maximum de données aberrantes pouvant être supprimées pour un niveau de concentration
- Nombre total de données aberrantes pouvant être supprimées d'une courbe d'étalonnage

---

**Remarque** : Cet algorithme est appliqué à tous les standards, y compris ceux qui sont exclus manuellement.

---

---

**Remarque** : Si le nombre de réplicats utilisés pour produire la régression est différent pour chaque niveau de standard, la fonction de suppression automatique des données aberrantes ne fonctionne pas parfaitement et ne doit être utilisée que comme point de départ. Examinez manuellement chaque courbe d'étalonnage.

---

---

**Conseil** ! Assurez-vous que les seuils de tolérance pour la précision des standards dans les critères d'acceptation de la méthode de traitement correspondent aux seuils de la boîte de dialogue Rules for Automatically Removing Outliers for Calibration Standards.

---

## Tableaux de résultats

Un tableau de résultat est une compilation des informations quantitatives et qualitatives associées à un ensemble d'échantillons. Il comporte les calculs de la concentration et de la précision déterminées par interpolation à partir de la courbe d'étalonnage standard. Les résultats de la recherche dans la bibliothèque, les résultats de recherche de formules et d'autres résultats d'analyse qualitative sont également disponibles dans le tableau de résultats. La surface, la hauteur et d'autres caractéristiques numériques peuvent être affichées. Le nombre et le type des colonnes du tableau de résultats peuvent être modifiés afin de simplifier la visualisation.

## Calibration Curves

Une courbe d'étalonnage, également appelée courbe de concentration standard, est une méthode qui permet de déterminer la concentration d'une substance dans un échantillon inconnu en comparant cet échantillon inconnu à un jeu d'échantillons standard dont la concentration est connue. La courbe d'étalonnage est un tracé de la réponse de l'instrument (le signal analytique) aux modifications de la concentration de l'analyte (la substance à mesurer). L'opérateur prépare une série d'étalons sur une plage de concentrations proches de la concentration attendue de l'analyte dans l'échantillon inconnu.

Les références d'étalonnage sont utilisées pour construire les courbes d'étalonnage. Les lectures incorrectes ou manquantes de certains des échantillons d'étalonnage peuvent indiquer des problèmes au niveau de la série analytique. Suivez des méthodes acceptables trouvées dans la documentation publiée et les orientations des organismes de réglementation pour créer une courbe d'étalonnage. Exemples de bonnes pratiques de préparation des courbes d'étalonnage :

- préparer des références d'étalonnage dans une matrice à « blanc » dans laquelle l'analyte doit être mesuré ;
- générer une courbe d'étalonnage pour chaque analyte à mesurer ;
- s'assurer de la couverture de la plage de concentration attendue de l'analyte, y compris pour des échantillons typiques et atypiques ;
- utiliser six à huit standards pour générer la courbe.

Cette liste n'est pas complète et d'autres orientations doivent être utilisées pour déterminer les bonnes pratiques de développement d'une courbe d'étalonnage pour le laboratoire.

---

**Remarque** : Dans certaines procédures analytiques, des références d'étalonnage en un point sont utilisées. Les étalonnages en un point sont réalisés à l'aide d'une matrice d'échantillon témoin et d'une seule concentration de l'étalon. La relation entre la réponse de l'instrument et la concentration de l'analyte est déterminée par la droite créée entre ces deux points. Les méthodes d'acquisition et de quantification doivent être validées avant d'être acceptées dans le cadre de l'utilisation prévue.

---

## Ratio signal sur bruit

Lors du traitement des données quantitatives de spectrométrie de masse, il est important de déterminer si un pic donné est significatif ou non, *significatif* signifiant généralement *qui excède le bruit de fond*.

### Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit

En règle générale, l'amplitude du pic est comparée au bruit de fond mesuré dans une région sans pic où le bruit est généralement estimé comme représentant une ou trois fois l'écart-type des points de données figurant dans cette plage. Cette approche est loin d'être idéale pour les motifs suivants :

- Elle est subjective, la région du bruit étant sélectionnée manuellement.



- Une région de bruit de fond sans pic pourrait ne pas exister ou la région pourrait être trop étroite pour estimer le bruit avec précision.
- Le bruit au point culminant pourrait être tout à fait différent de celui dans la région du bruit sélectionnée.
- Le facteur « un ou trois » est également subjectif et des autorités différentes émettent des recommandations différentes.
- Le bruit apparent peut être modifié si les données ont été prétraitées. Par exemple, il peut être lissé ou seuillé.

Le concept de bruit relatif ( $R_n$ ) permet de développer facilement une méthode simple pour calculer le bruit attendu à un point quelconque des données afin de le comparer au signal mesuré. Il s'agit d'une métrique objective et fiable qui peut servir à calculer le ratio signal sur bruit (S/N) et à évaluer et comparer les performances de l'instrument et du dosage. Le concept de bruit relatif revêt de nombreuses applications, notamment le calcul du ratio S/N.

L'algorithme fondamental fonctionne comme suit :

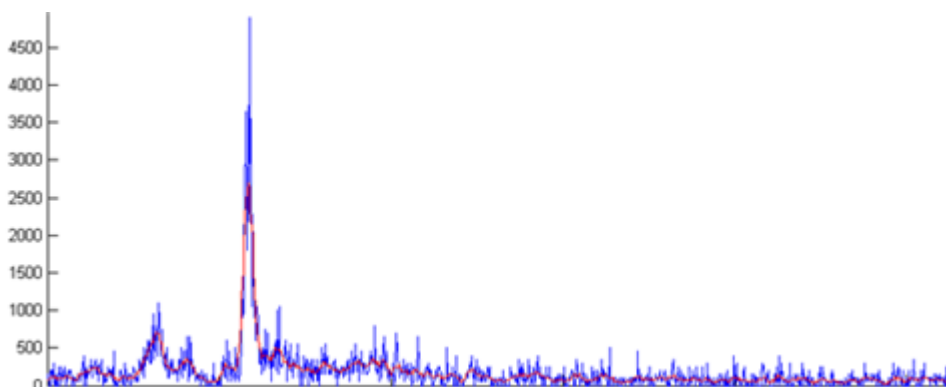
1. Élaborer un modèle de bruit permettant à l'utilisateur de calculer le bruit attendu à un point quelconque de l'enregistrement de données compte tenu du niveau du signal sous-jacent à ce point.

Le modèle de bruit peut être déterminé à partir de considérations théoriques ou il être modélisé à partir de mesures réelles pour un système spécifique. Pour les détecteurs de comptage d'impulsions, l'écart-type d'un signal, et par conséquent le bruit attendu, est proportionnel à la racine carrée du signal et varie par conséquent avec le signal. Les autres systèmes comprendront un composant « bruit blanc » constant éventuellement combiné à un composant dépendant de l'intensité.

2. Estimer le signal sous-jacent à partir du signal mesuré.

Il est possible de réaliser cette tâche selon plusieurs méthodes, mais la plus simple consiste à générer une version lissée des données. Voir la figure : [Illustration A-15](#).

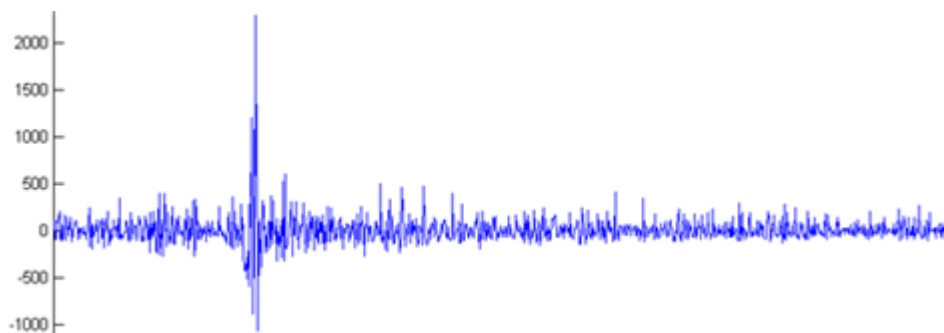
### Illustration A-15 : Superposition des données brutes et lissées



3. Mesurer le bruit réel sur les données en utilisant tous les points : pics et bruit de fond.  
Pour ce faire, soustraire l'estimation du signal sous-jacent du signal mesuré à chaque point des données où le signal lissé a été soustrait du signal d'origine. Ce résultat est

également connu sous le nom de bruit delta. La plage du bruit delta est raisonnablement constante, excepté au niveau des grands pics, car le bruit dépend du signal et est par conséquent plus important lorsque le signal est plus grand. Voir la figure : [Illustration A-16](#).

### Illustration A-16 : Tracé des valeurs de bruit delta de chaque point de données



4. À chaque point de données, calculez le ratio du bruit mesuré par rapport au bruit attendu.

En d'autres termes, à chaque point de données, divisez le bruit mesuré à l'étape [par la valeur prédite par le modèle de bruit, dans ce cas, la racine carrée de l'intensité](#).

Si le modèle de bruit est correct, le logiciel génère alors une série de valeurs demeurant essentiellement contraintes par des limites. Voir la figure suivante. Cette figure représente également le tracé de

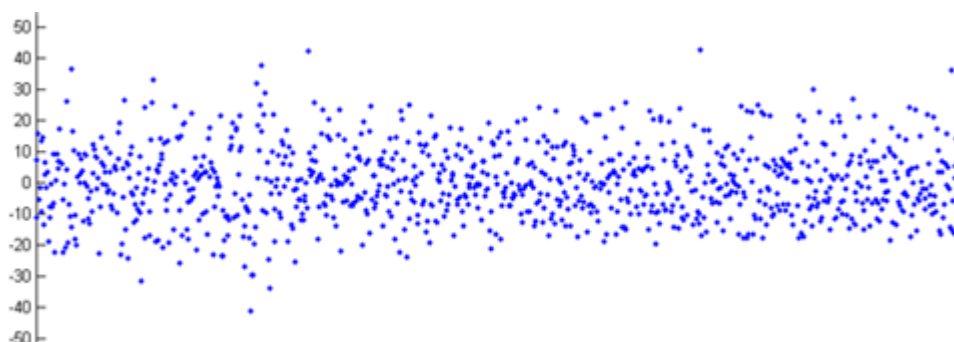
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

---

**Remarque :** Cette étape diminue la variation importante du bruit delta et produit un ensemble de valeurs bien délimitées.

---

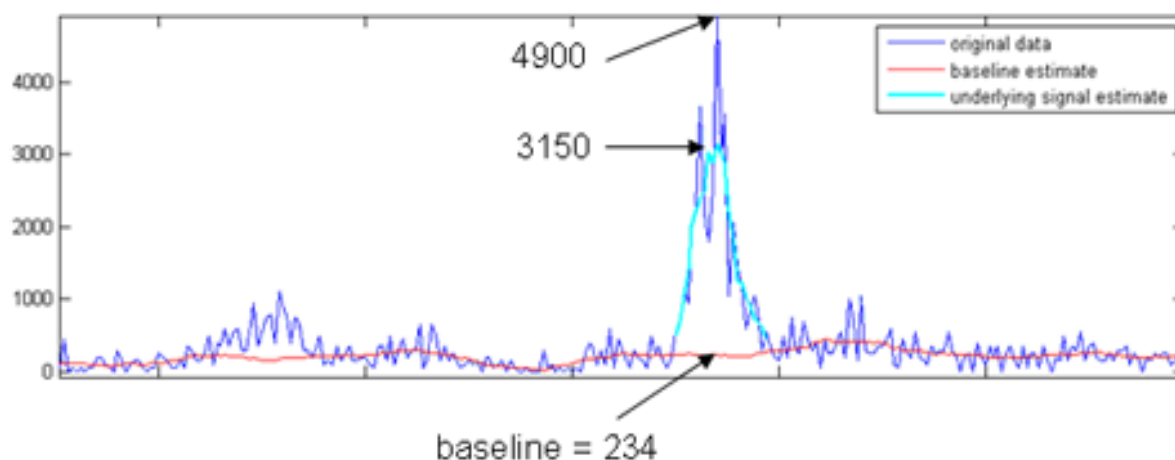
### Illustration A-17 : Modèle de bruit



5. Calculer l'écart-type des valeurs du ratio. Il s'agit du  $R_n$ , une estimation de la relation la plus vraisemblable entre le bruit delta réel et celui prédit par le modèle. Sur la figure précédente, la valeur obtenue est de 9,5.

La figure suivante illustre un exemple d'utilisation du bruit relatif pour calculer le ratio S/N.

**Illustration A-18 : Superposition des données brutes, des estimations du signal sous-jacent et des estimations de la ligne de base**



Comme décrit précédemment :

$$noise = R_n \times \sqrt{(baseline)}$$

Dans cet exemple :

$$noise = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Si le point culminant du pic est utilisé comme signal, le ratio S/N est alors de 34 (4 900/145) et si l'amplitude du signal lissé est utilisée, le ratio S/N est alors de 22 (3 150/145).

Lors de la communication du ratio S/N, l'algorithme d'intégration MQ4 utilise la procédure décrite ici et le point culminant du pic comme signal. Comme l'algorithme d'intégration AutoPeak ajuste un modèle au pic, il utilise l'amplitude du profil ajusté. Le ratio S/N communiqué est ainsi plus petit. Toutefois, il représente une valeur plus précise, car il est moins affecté par d'éventuels pics de bruit. L'algorithme d'intégration AutoPeak adopte également une approche plus sophistiquée de l'estimation de la ligne de base de sorte que pour ces deux motifs, les valeurs du ratio S/N communiquées par les deux algorithmes ne sont pas identiques bien qu'elles soient généralement similaires.

Pour résumer, par rapport à l'approche habituelle d'estimation du bruit en tant qu'écart-type d'une région de bruit de fond, l'approche du bruit relatif pour le calcul du ratio S/N comporte les avantages suivants :

- Elle est bien moins subjective, car il n'est pas nécessaire de sélectionner manuellement une région de bruit de fond.
- Il est possible de prédire un ratio S/N précis, même s'il n'existe aucune région sans pic sur le chromatogramme.

- Pour les algorithmes d'intégration AutoPeak et Summation, la ligne de base, et donc le bruit, sont estimés près du pic d'intérêt. Pour l'algorithme d'intégration MQ4, la ligne de base est l'intensité du point de données au pourcentage de bruit spécifié par l'utilisateur. Par exemple, si le pourcentage de bruit spécifié par l'utilisateur est de 40 % et qu'il y a 100 points de données, l'algorithme d'intégration MQ4 trie les points de données de la plus petite à la plus grande intensité et utilise l'intensité du point de données avec la quarantième plus petite intensité.

Cela peut faire une grande différence quant à la valeur du ratio S/N communiquée, car la région de bruit de fond sélectionnée pour l'approche habituelle pourrait être bien plus silencieuse que le bruit de fond près du pic. Comme décrit précédemment, le ratio S/N calculé selon l'approche Relative Noise pourrait produire des valeurs plus petites que l'approche habituelle. Ce sont toutefois là des valeurs plus précises et plus utiles. Voir [Illustration A-18](#).

Pour rendre la colonne **Signal / Noise** visible dans le tableau de résultats, voir [Personnaliser le tableau de résultats](#).

### Remarque sur le ratio signal sur bruit lors de l'utilisation de l'algorithme d'intégration SignalFinder

Comme l'algorithme d'intégration AutoPeak calcule le ratio signal sur bruit de manière plus précise (et prédit par conséquent les CV de manière plus précise), si l'approche du ratio signal sur bruit à 1-sigma est utilisée, envisager alors de diminuer la valeur du ratio signal sur bruit minimum acceptable lors des procédures opérationnelles normalisées (SOP) selon les données empiriques du laboratoire.

### Ratio signal sur bruit avec pic à pic

Si cet algorithme de ratio signal sur bruit est utilisé, le logiciel calcule l'écart-type de tous les points de données chromatographiques entre les heures de début et de fin de bruit de fond spécifiées. Le logiciel calcule le ratio signal sur bruit pour le chromatogramme actif, soustrait le signal de bruit de fond moyen du pic sélectionné, puis divise le signal soustrait par le niveau de bruit de pic à pic. Il différencie ensuite les régions de bruit et des pics en fonction des intensités maximales de chaque région. Une fois terminé, le chromatogramme actif est étiqueté avec le ratio signal sur bruit.

### Ratio signal sur bruit avec écart-type

Lorsque cet algorithme de ratio signal sur bruit est utilisé, le logiciel calcule le ratio signal sur bruit des pics chromatographiques et les étiquette. Cet algorithme nécessite la sélection de deux régions sur le chromatogramme :

- La région du bruit
- Le pic d'intérêt

Le logiciel détermine ensuite quelle région contient le pic et quelle région contient le bruit en fonction des intensités maximales dans chaque sélection. Il soustrait l'intensité moyenne du signal de bruit de fond de l'intensité de signal de pic, puis divise le signal soustrait par un facteur spécifié par l'utilisateur multiplié par l'écart-type de la région du bruit.

## Définir des régions de bruit

Utilisez cette procédure pour définir des régions de bruit si l'écart-type ou l'algorithme de pic à pic est utilisé.

---

**Remarque** : Un seul algorithme de ratio signal sur bruit peut être utilisé dans un tableau de résultats. Pour appliquer un autre algorithme de ratio signal sur bruit aux données, modifiez les paramètres par défaut du projet puis créez un nouveau tableau de résultats.

---

1. Dans les paramètres par défaut du projet, sélectionnez l'algorithme de ratio signal sur bruit **Standard Deviation** ou **Peak-to-Peak**.

---

**Conseil !** Pour ouvrir les paramètres par défaut du projet, cliquez sur **Projects > Project default settings**.

---

2. Créez une méthode de traitement.
3. Sur la page Integration, cliquez sur **Options > Show Noise Regions**.
4. (Si nécessaire) Utilisez la souris pour ajuster la région de bruit.

---

**Remarque** : La région de bruit doit être définie pour chaque transition.

---

5. Traitement des données.
6. Dans le volet Peak review, cliquez sur **Options > Show Noise Regions**.
7. (Si nécessaire) Utilisez la souris pour ajuster la région de bruit.

## Colonnes calculées

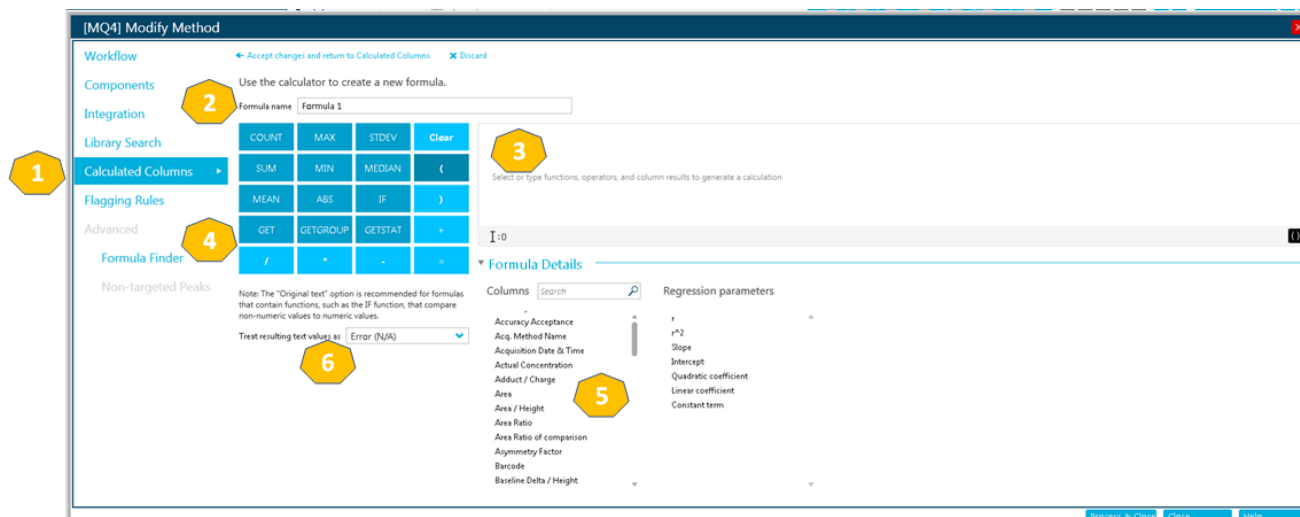
Les colonnes calculées sont des formules qui entraînent l'ajout de nouvelles colonnes personnalisées au tableau de résultats. Après la création d'une formule et le traitement (ou retraitement) des données, les résultats de la formule apparaissent dans une nouvelle colonne personnalisée.

## Navigation dans l'interface des colonnes calculées

Les colonnes calculées sont créées dans une méthode de traitement. Elles peuvent être importées et exportées comme fichiers `frm1` pour être partagées ou utilisées ultérieurement.

La figure suivante présente l'interface de l'éditeur de formule.

Illustration A-19 : Interface utilisateur des colonnes calculées



Élément	Description
1	L'étape <b>Calculated Columns</b> dans le flux de travail de la méthode de traitement. Cliquez pour ouvrir la page Calculated Columns. Cliquez ensuite sur <b>Add Formula</b> (pas illustré).
2	Le champ <b>Formula name</b> . Saisissez un nom pour la formule.  <b>Remarque</b> : Le nom de la formule ne peut pas contenir les noms des fonctions sur la calculatrice, des crochets ni des parenthèses.
3	Le champ <b>Formula</b> .
4	Une calculatrice contenant des fonctions et opérateurs utilisés fréquemment. Les opérateurs supplémentaires suivants peuvent être saisis dans le champ de formule : <ul style="list-style-type: none"> <li>• &gt; (supérieur à)</li> <li>• &gt;= (supérieur ou égal à)</li> <li>• &lt; (inférieur à)</li> <li>• &lt;= (inférieur ou égal à)</li> <li>• != (pas égal à)</li> </ul> <p>Pour plus d'informations sur ces opérateurs et fonctions, consultez le <i>système d'aide</i>.</p>
5	Paramètres de régression et colonnes du tableau de résultats disponibles.  <b>Remarque</b> : Cette liste n'est pas disponible dans les tableaux <i>qsession</i> .

Élément	Description
6	<p>Le menu <b>Treat resulting text values as</b> permet de configurer le traitement des entrées texte. Cette option est importante dans les colonnes du tableau de résultats pouvant contenir des valeurs numérique et du texte.</p> <p>Par exemple, les colonnes des concentrations calculées peuvent contenir des valeurs numériques et des valeurs non numériques, telles que N/A, dégénéré et infini.</p>

**Remarque** : Lorsque l'utilisateur commence à saisir une formule qui utilise un groupe d'échantillons, un élément de sélection d'échantillons devient disponible.

## Extraction simple d'autres informations que les informations par défaut

La fonction de colonnes calculées permet d'afficher des informations qui ne sont pas disponibles par défaut dans les tableaux de résultats.

Par exemple, pour afficher  $R^2$  comme colonne du tableau de résultats, l'utilisateur peut créer une formule égale à  $R^2$ .

### Illustration A-20 : Création d'une colonne personnalisée avec des colonnes calculées

[← Accept changes and return to Calculated Columns](#) [✕ Discard](#)

Use the calculator to create a new formula.

Formula name

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF	)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

[r^2]

I:5

#### Formula Details

Columns  

Regression parameters

Accuracy  
Accuracy Acceptance  
Acq. Method Name  
Acquisition Date & Time  
Actual Concentration

r  
r<sup>2</sup>  
Slope  
Intercept  
Quadratic coefficient

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as

### Arithmétique simple

Il est possible de créer des formules simples pour réaliser des opérations mathématiques de base.

#### Exemple : R<sup>2</sup>

```
[r] * [r]
```

Dans cet exemple, la valeur R<sup>2</sup> est reproduite en utilisant l'opérateur de multiplication (\*) pour multiplier la valeur R par elle-même.

#### Exemple : points par seconde collectés

```
[Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60)
```

Dans cet exemple, les points sur la ligne de base sont divisés par les secondes du début à la fin d'un pic chromatographique intégré. Cette formule utilise les opérateurs de division (/), de multiplication (\*) et de soustraction (-).

### Fonctions plus complexes

Il existe beaucoup d'autres fonctions et structures de contrôle, telles que **MEAN()**, **MAX()** et **MIN()**. Elles apparaissent dans la calculatrice sous la barre de formule.

Pour une liste complète des détails de syntaxe, opérateurs et fonctions, consultez le *système d'aide*.

#### Exemple : MOYENNE([Aire]) pour les standards

Lors de l'utilisation d'une fonction qui agit sur toutes les valeurs, l'utilisateur peut sélectionner les échantillons à inclure dans le calcul.



## Illustration A-21 : Obtention de la moyenne de l'aire de pic des échantillons standard uniquement

← Accept changes and return to Calculated Columns    ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name:

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF	)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

MEAN([Area])

I :12

Formula Details

Columns

Regression parameters

MEAN value will be calculated using the following sample types:

Accuracy

Accuracy Acceptance

Acq. Method Name

Acquisition Date & Time

Actual Concentration

Adduct / Charge

Area

Area / Height

Area Ratio

Area Ratio of comparison

Asymmetry Factor

Barcode

r

r<sup>2</sup>

Slope

Intercept

Quadratic coefficient

Linear coefficient

Constant term

Unknowns

Only if the sample name contains...

Standards

Only if the sample name contains...

QCs

Only if the sample name contains...

Blanks

Solvent    Blank    Double blank

Only if the sample name contains...

### Exemple : association de fonctions

Il est possible d'associer des fonctions arithmétiques simples à des fonctions plus complexes. Par exemple, pour calculer les points moyens par seconde collectés, utilisez la formule suivante :

```
MEAN([Points Across Baseline]/(((End Time]-[Start Time])*60))
```

## Énoncés IF

La fonction **IF** réalise un test logique et renvoie une valeur pour un résultat vrai et une autre pour un résultat faux. Les fonctions **IF** imbriquées permettent de tester plusieurs conditions. La fonction **IF** peut être associée à d'autres fonctions logiques telles que **and** et **or** pour étendre un test logique.

**Remarque** : « && » et « || » peuvent être utilisés respectivement pour **and** et **or**. Les opérateurs **and** et **or** doivent être entourés d'espaces, mais pas les opérateurs && et ||.

La syntaxe de base de l'énoncé **IF** est la suivante :

```
if(<condition>;<value if true>;<value if false>)
```

- *<condition>* est une valeur ou une expression logique qui peut être évaluée comme vraie ou fausse.
- *<valeur si vrai>* est une valeur à retourner et afficher dans la colonne correspondante du tableau de résultats lorsque la *<condition>* est évaluée comme vraie.

## Principes de fonctionnement - Logiciel

---

- *<valeur si faux>* est une valeur à retourner et afficher dans la colonne correspondante du tableau de résultats lorsque la *<condition>* est évaluée comme fausse.

---

**Remarque** : le symbole de la fonction **IF** peut être sélectionné dans la calculatrice, saisi ou copié depuis une autre source. Il peut être utilisé dans la syntaxe **if** ou **IF**.

---

La fonction **IF** permet d'utiliser d'autres fonctions numériques, telles que **MEAN**, **STDEV**, etc. dans la formule et dans les expressions *<condition>*, *<valeur si vrai>* ou *<valeur si faux>*.

### Exemple : *<condition>*

Certains exemples de *<condition>* incluent :

```
[Peak Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

```
[Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2
```

### Exemple : *<valeur si vrai>* et *<valeur si faux>*

*<valeur si vrai>* et *<valeur si faux>* peuvent être une valeur numérique ou un texte.

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT window'; 'not applicable')
```

### Exemple : valeur moyenne de surface du standard interne

Dans cet exemple, la valeur moyenne de surface du standard interne (SI) est calculée sur les échantillons souhaités et comparée à une valeur de 1e6. La surface moyenne du SI est affichée dans la colonne correspondante du tableau de résultats si **MEAN ([IS Area])** est supérieur à 1e6, c'est-à-dire si la *<condition>* est vraie. Si **MEAN ([IS Area])** est inférieur à 1e6, c'est-à-dire si la *<condition>* est fausse, la colonne du tableau de résultats contient **Review IS performance**, la *<valeur si faux>*.

```
IF(MEAN([IS Area])>=1e6;'MEAN([IS Area]');'Review IS performance')
```

---

**Remarque** : Seules les fonctions **IF** peuvent contenir plusieurs calculs.

---

## Traiter les valeurs de texte résultantes comme

L'option **Treat resulting text values as** détermine comment le texte est interprété dans une colonne personnalisée du tableau des résultats contenant du texte ou une combinaison de nombres et de texte. Par exemple, la colonne **Sample Type** contient uniquement du texte, la colonne **Precursor Mass** contient uniquement des valeurs numériques et la colonne **Calculated Concentration** peut contenir des valeurs numériques et du texte.

Selon les fonctions utilisées dans une formule, l'option **Treat resulting text values as** permet une interprétation spécifique des valeurs de texte dans la colonne sur laquelle repose le calcul. Les options disponibles comprennent :

- **Zero**
- **Ignore (blank)**
- **Error (N/A)**
- **Original text**

---

**Remarque** : Pour plus d'informations sur ces options, consultez le *système d'aide*.

---

Si les calculs reposent sur les fonctions **COUNT**, **MAX**, **STDEV**, **SUM**, **MIN**, **MEDIAN**, **GET**, **GETGROUP**, **SLOPE**, **INTERCEPT**, **MAD** ou **GETSTAT**, les options recommandées sont **Zero**, **Ignore (blank)** ou **Error (N/A)**. Ces options sont également recommandées dans les énoncés **IF** lorsque la formule contient des colonnes supposées présenter des valeurs numériques.

**Original text** est l'option recommandée dans les énoncés **IF** où les composants des expressions *<condition>*, *<valeur si vrai>* et *<valeur si faux>* peuvent être à la fois numériques et du texte, en particulier si d'autres fonctions sont utilisées.

---

**Remarque** : Dans les énoncés **IF** avec plus d'une *<condition>*, l'absence d'évaluation même d'une seule *<condition>* produit un résultat *<valeur si faux>* dans la colonne personnalisée du tableau de résultats.

---

### Exemple

Dans cet exemple, les colonnes utilisées dans la formule peuvent contenir à la fois du texte et des valeurs numériques. L'option **Original text** est donc recommandée.

```
IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated Concentration];  
'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))<=15;  
'Low Range';IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated  
Concentration]  
;'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))  
<=65;'Normal Range';'Over normal range'))
```

Cette formule **IF** contient à la fois les colonnes **Sample Type** et **Calculated Concentration**. Les valeurs de la colonne **Sample Type** doivent être traitées comme **Original text**. Pour la colonne **Calculated Concentration**, il peut être nécessaire de traiter les valeurs non numériques telles que **<0** et **Degenerate** comme **Zero**.

Comme les valeurs non numériques doivent être traitées différemment, nous recommandons de séparer la formule en plusieurs formules plus petites afin de mieux contrôler les valeurs non numériques.

# Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact

## B

Si la fermeture de contact est configurée sur le système, elle peut être utilisée pour étalonner le système en mode par lots et manuel :

- Mode par lots : le système peut être étalonné avec le CDS ou une méthode LC. Voir [Étalonner le système en mode Batch](#).
- Mode manuel : le système peut être étalonné avec le CDS ou une méthode LC. Commencez la méthode en cliquant sur **Start** ou **Start with LC** dans l'espace de travail MS Method. Lorsque l'état devient **Load**, commencez l'injection sur l'appareil LC.

---

**Remarque** : L'espace de travail MS Tune ne prend pas en charge la fonction de fermeture de contact. MS Tune n'attend pas le signal de fermeture de contact.

---

## Étalonner le système en mode Batch

Utilisez un CDS ou une méthode LC pour étalonner le système.

### Étalonner le système à l'aide du CDS

Si le système communique avec un périphérique externe via la fermeture de contact, suivez les consignes ci-après pour étalonner le système à l'aide d'un CDS :

- Configurez les propriétés d'étalonnage automatique, y compris le nombre d'échantillons entre les étalonnages.
- Synchronisez les méthodes sur le système LC et le spectromètre de masse pour permettre l'étalonnage entre les échantillons. Les sections suivantes décrivent deux options différentes pour le faire.
- Après la soumission du lot, attendez que l'étalonnage initial soit terminé, puis, lorsque l'état du système est Loading, commencez l'injection sur le périphérique externe.

#### Option 1

Pour synchroniser le système LC et le spectromètre de masse, assurez-vous que les méthodes LC sont au moins deux minutes plus longues que les méthodes du spectromètre de masse.

Les exemples suivants montrent le lot et la file d'attente dans SCIEX OS, ainsi que le programme correspondant sur le périphérique externe pour un lot dans lequel l'étalonnage est effectué après chaque troisième échantillon.

**Illustration B-1 : Étalonnage du CDS : exemple de lot**

Option 1	
	MS Method
1 Sample 1	option-1
2 Sample 2	option-1
3 Sample 3	option-1
4 Sample 4	option-1
5 Sample 5	option-1
6 Sample 6	option-1

**Illustration B-2 : Étalonnage du CDS : exemple de file d'attente**

Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 1 - 8 samples				
⌚	3/9/2018 11:06:18 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:07:34 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:09:35 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:11:36 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:37 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:14:53 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:16:54 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:18:55 AM	Sample 6	option-1		option-1

**Tableau B-1 : Séquence d'échantillonnage sur le périphérique externe**

Durée (mm:ss)	Injection
00:00	Échantillon 1
12:00	Échantillon 2
24:00	Échantillon 3
36:00	Échantillon 4

## Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact

Tableau B-1 : Séquence d'échantillonnage sur le périphérique externe (suite)

Durée (mm:ss)	Injection
48:00	Échantillon 5
60:00	Échantillon 6

### Option 2

Cette option est adaptée à un flux de travail avec une méthode LC courte.

Suivez les consignes ci-après pour synchroniser le système LC et le spectromètre de masse :

- Pour tous les étalonnages à l'exception du premier du lot, configurez le périphérique externe pour injecter un échantillon témoin au moment où l'étalonnage est programmé. Par exemple, si trois échantillons sont acquis entre les étalonnages, assurez-vous qu'un échantillon témoin est injecté toutes les quatre injections.
- Veillez à ce que le temps d'exécution de l'échantillon témoin sur le périphérique externe soit de 2 minutes ou plus. (L'étalonnage du CDS prend 2 minutes.) Assurez-vous que la durée de la méthode est inférieure ou égale au temps écoulé entre les injections.


Les exemples suivants montrent le lot et la file d'attente dans SCIEX OS, ainsi que le programme correspondant sur le périphérique externe pour un lot dans lequel l'étalonnage est effectué après chaque troisième échantillon.

Illustration B-3 : Étalonnage du CDS : exemple de lot

The screenshot displays the SCIEX OS software interface. At the top, there is a blue header bar with a home icon, a 'Batch' dropdown menu, and a grid icon. Below this is a toolbar with buttons for 'Auto-Calibrate...', 'Plate Layout...', 'New', 'Open', and 'Save'. The main content area is titled 'Option 2' and contains a table with the following data:

	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	option-2
2	Sample 2	option-2
3	Sample 3	option-2
4	Sample 4	option-2
5	Sample 5	option-2
6	Sample 6	option-2
7		

**Illustration B-4 : Étalonnage du CDS : exemple de file d'attente**



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	<b>Option 2 - 8 samples</b>				
⌚	3/9/2018 11:02:41 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:03:57 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:05:58 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:07:59 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:10:00 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:11:16 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:17 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:15:18 AM	Sample 6	option-1		option-1

**Tableau B-2 : Séquence d'échantillonnage sur le périphérique externe**

Durée (mm:ss)	Injection
00:00	Échantillon 1
02:00	Échantillon 2
04:00	Échantillon 3
06:00	Blanc
08:00	Échantillon 4
10:00	Échantillon 5
12:00	Échantillon 6

## Étalonner le système à l'aide du système LC

Si le système communique avec un périphérique externe via la fermeture de contact, suivez les consignes ci-après pour étalonner le système à l'aide du périphérique externe :

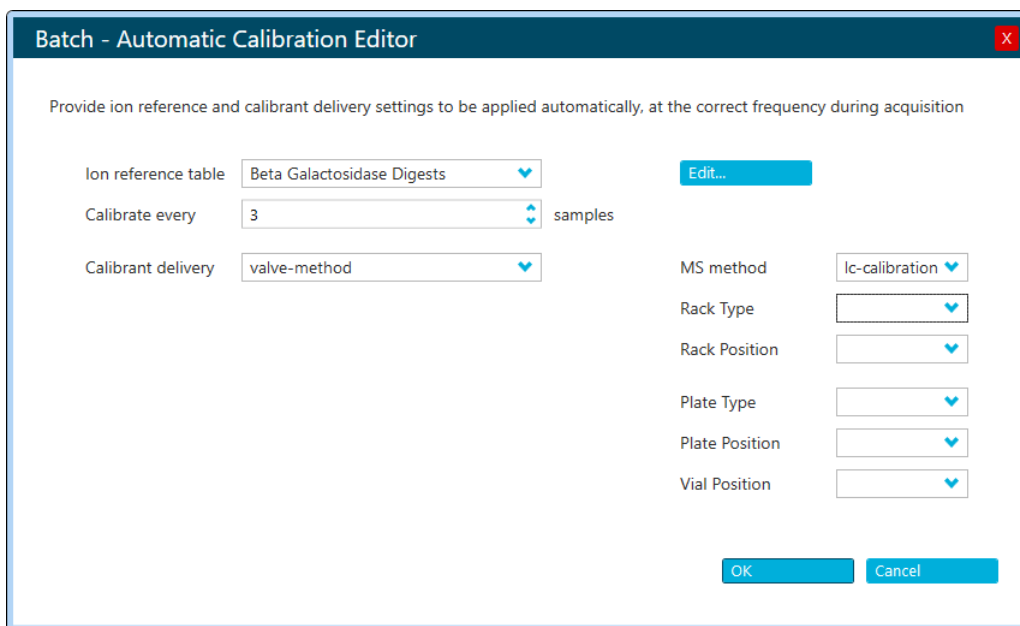
- Dans les propriétés du spectromètre de masse, configurez une vanne pour simuler le périphérique externe.
- Créez une méthode LC pour la vanne.
- Assurez-vous que la durée de la méthode est inférieure ou égale au temps écoulé entre les injections sur le périphérique externe.
- Configurez les propriétés d'étalonnage automatique pour le lot : sélectionnez le tableau de référence des ions, puis définissez la fréquence d'étalonnage. Pour **Calibrant delivery**,

## Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact

---

sélectionnez la méthode LC pour la vanne et pour **MS method**, sélectionnez la méthode MS à utiliser.

### Illustration B-5 : Étalonnage LC : éditeur d'étalonnage automatique



Batch - Automatic Calibration Editor

Provide ion reference and calibrant delivery settings to be applied automatically, at the correct frequency during acquisition

Ion reference table: Beta Galactosidase Digests Edit...

Calibrate every: 3 samples

Calibrant delivery: valve-method

MS method: lc-calibration

Rack Type:

Rack Position:

Plate Type:

Plate Position:

Vial Position:

OK Cancel

---

**Remarque :** Veillez à entrer un temps de rétention pour chaque peptide dans le tableau de référence.

---

- Soumettez le lot et démarrez la file d'attente. Vérifiez que les entrées de la file d'attente correspondent aux entrées du programme sur le périphérique externe.
- Démarrez l'injection sur le périphérique externe.

Les exemples suivants montrent le lot et la file d'attente dans SCIEX OS, ainsi que le programme correspondant sur le périphérique externe pour un lot dans lequel l'étalonnage est effectué après chaque troisième échantillon. La durée pour la méthode MS est de 1 minute. La durée pour la méthode d'étalonnage est également de 1 minute.



## Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact

Illustration B-6 : Étalonnage LC : lot

The screenshot shows the 'Batch' interface with a table titled 'LC-calibration'. The table has two columns: 'Sample Name' and 'MS Method'. The rows are numbered 1 through 7. The first row is highlighted in blue.

	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	Ic-calibration
2	Sample 2	Ic-calibration
3	Sample 3	Ic-calibration
4	Sample 1	Ic-calibration
5	Sample 2	Ic-calibration
6	Sample 3	Ic-calibration
7		

Illustration B-7 : Étalonnage LC : file d'attente

The screenshot shows the 'Queue' interface with a table listing samples in a queue. The table has columns for Status, Est. Start Time, Sample Name, MS Method, LC Method, Data File, and Project. A 'Start' button is visible in the top right corner.

Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File	Project
LC-calibration - 8 samples						
🕒	12/18/2017 1:57:03 PM	Cal	Ic-calibration	valve-method	Cal	
🕒	12/18/2017 1:59:04 PM	Sample 1	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:00:05 PM	Sample 2	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:01:06 PM	Sample 3	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:02:07 PM	Cal	Ic-calibration	valve-method	Cal	
🕒	12/18/2017 2:04:08 PM	Sample 1	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:05:09 PM	Sample 2	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:06:10 PM	Sample 3	Ic-calibration		Sample	

Tableau B-3 : Séquence d'échantillonnage sur le périphérique externe

Durée (mm:ss)	Injection
00:00	Solution d'étalonnage
01:00	Échantillon 1
02:00	Échantillon 2

## Étalonner un système configuré avec la fermeture de contact

---

Tableau B-3 : Séquence d'échantillonnage sur le périphérique externe (suite)

Durée (mm:ss)	Injection
03:00	Échantillon 3
04:00	Solution d'étalonnage
05:00	Échantillon 1
06:00	Échantillon 2
07:00	Échantillon 3

## Étalonnage en mode Manual

Cette section décrit comment utiliser la fermeture de contact pour étalonner le système lors de l'exécution manuelle d'une méthode dans l'espace de travail MS Method.

### Étalonner le système avec le CDS

1. Dans l'espace de travail MS Method, ouvrez la méthode à exécuter.
2. Cliquez sur **Advanced > Calibrate**.
3. Dans le champ **Ion Reference Table**, sélectionnez **X500 Positive Calibration Solution** ou **X500 Negative Calibration Solution**, selon la polarité de la méthode.
4. Sélectionnez **Apply Calibration**.
5. Cliquez sur **OK**.
6. Cliquez sur **Start**.

### Étalonner le système selon la méthode LC

Si le système communique avec un périphérique externe via la fermeture de contact, suivez les consignes ci-après pour étalonner le système à l'aide du périphérique externe :

- Dans les propriétés du spectromètre de masse, configurez une vanne pour simuler le périphérique externe.
  - Créez une méthode LC qui contient une vanne et dont la durée est inférieure ou égale à la durée de la méthode MS.
1. Dans l'espace de travail MS Method, ouvrez la méthode MS à exécuter.
  2. Cliquez sur **Start with LC** et sélectionnez la méthode LC.
  3. Lorsque l'état du système devient **Loading**, commencez l'injection sur l'appareil LC.

# Masses exactes et formules chimiques

# C

## Résérpine

Tableau C-1 : Masses exactes de résérpine (C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>N<sub>2</sub>O<sub>9</sub>)

Description	Masse
Ion moléculaire C <sub>33</sub> H <sub>41</sub> N <sub>2</sub> O <sub>9</sub>	609,28066
Fragment C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> NON <sub>8</sub>	448,19659
Fragment C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	397,21218
Fragment C <sub>22</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	365,18597
Fragment C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> NON <sub>3</sub>	236,12812
Fragment C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	195,06519
Fragment C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NON	174,09134

## Peptide ALILTLVS

Tableau C-2 : Masse de l'extrait du peptide ALILTLVS

Nom	Séquence	Masse	État de charge
Ion précurseur	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811,5288	1+
b7	ALILTLV	724,4967	1+
b7-18	ALILTLV	706,4862	1+
b6-18	ALILTLV	607,4178	1+
y5	LTLVS	532,3341	1+
b5	ALILT	512,3443	1+
b5-18	ALILT	494,3337	1+
b4	ALIL	411,2966	1+
b3	ALI	298,2125	1+
Fragment interne y b	IL ou LI	227,1754	1+
Fragment interne y b	LT ou TL	215,139	1+

## Masses exactes et formules chimiques

---

**Tableau C-2 : Masse de l'extrait du peptide ALILTLVS (suite)**

Nom	Séquence	Masse	État de charge
b2	AL	185,1285	1+
a2	AL	157,1335	1+
ions immonium	I ou L	86,09643	1+

## Introduction

Ce document fournit un aperçu de certains outils et de certaines fonctionnalités disponibles dans le logiciel. Il ne fournit pas une description détaillée de chaque opération disponible mais il explique les flux de travaux les plus courants auxquels le logiciel peut répondre.

## Société

Alors que certaines fonctions et opérations sont propres à certaines applications et à certains flux de travaux, la plupart sont standard et sont fréquemment utilisées lors de l'exploration des données qualitatives. Cette section du document fournit une brève introduction aux concepts du logiciel et une description de certaines opérations les plus courantes et les plus fondamentales. Les sections suivantes décrivent les approches en matière de flux de travaux spécifiques et utilisent les fichiers de données d'échantillon fournis avec le logiciel.

Les fichiers d'échantillon sont disponibles dans [sciex.com/software-support/software-downloads](https://sciex.com/software-support/software-downloads), sous **SCIEX OS resources**. Copiez l'ensemble du projet dans le dossier `D:\SCIEX OS DATA` de l'ordinateur. Les exemples de ce tutoriel utilisent les fichiers d'échantillon suivants :

- Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff
- Bromocrip\_IDA-DBS in plasma\_T=0.wiff
- Bromocrip\_IDA-DBS in plasma\_T=1.wiff
- DataSET61.wiff
- DataSET62.wiff
- DataSET63.wiff
- DataSET64.wiff
- DataSET65.wiff
- DataSET66.wiff
- RP\_digests.wiff
- RP\_Intact.wiff
- Bromocriptine.mol

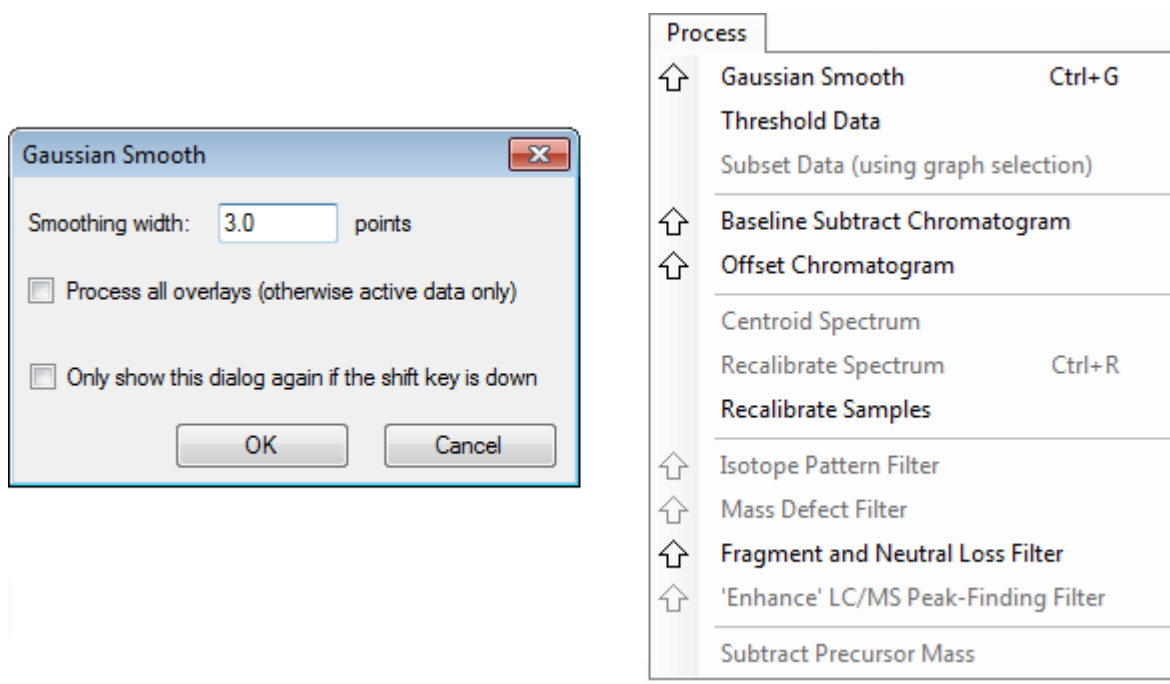
Les fichiers Bromocriptine proviennent des analyses IDA en mode négatif d'une incubation avec des microsomes hépatiques du rat. Le fichier Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff a été généré à partir d'un repère temporel d'une heure, et les deux autres ont été générés à partir des repères temporels de zéro et d'une heure d'inoculation dans le plasma. Le fichier Bromocriptine.mol contient la structure moléculaire de la bromocriptine. Les fichiers DataSET61 à DataSET66 sont des fichiers qui ont été générés à partir de la loratadine et

de ses impuretés. Les différents ensembles de données représentent différents niveaux de concentration. Le fichier RP\_Intact.wiff est généré à partir d'une analyse de la myoglobine intacte. Le fichier RP\_digests.wiff est généré à partir d'une analyse de la digestion triptyque de la myoglobine.

## Options

Le logiciel offre de nombreuses options pour affiner le comportement des commandes. Certaines options, comme indiqué dans la [Illustration D-1](#), sont dotées d'une case à cocher qui permet d'afficher la boîte de dialogue uniquement si vous appuyez sur la touche **Shift (Maj)**. Ceci élimine le besoin d'interagir avec la boîte de dialogue si la modification des paramètres n'est pas nécessaire. Le menu pour ces commandes contient une flèche orientée vers le haut.

**Illustration D-1 : Options**



## Volets

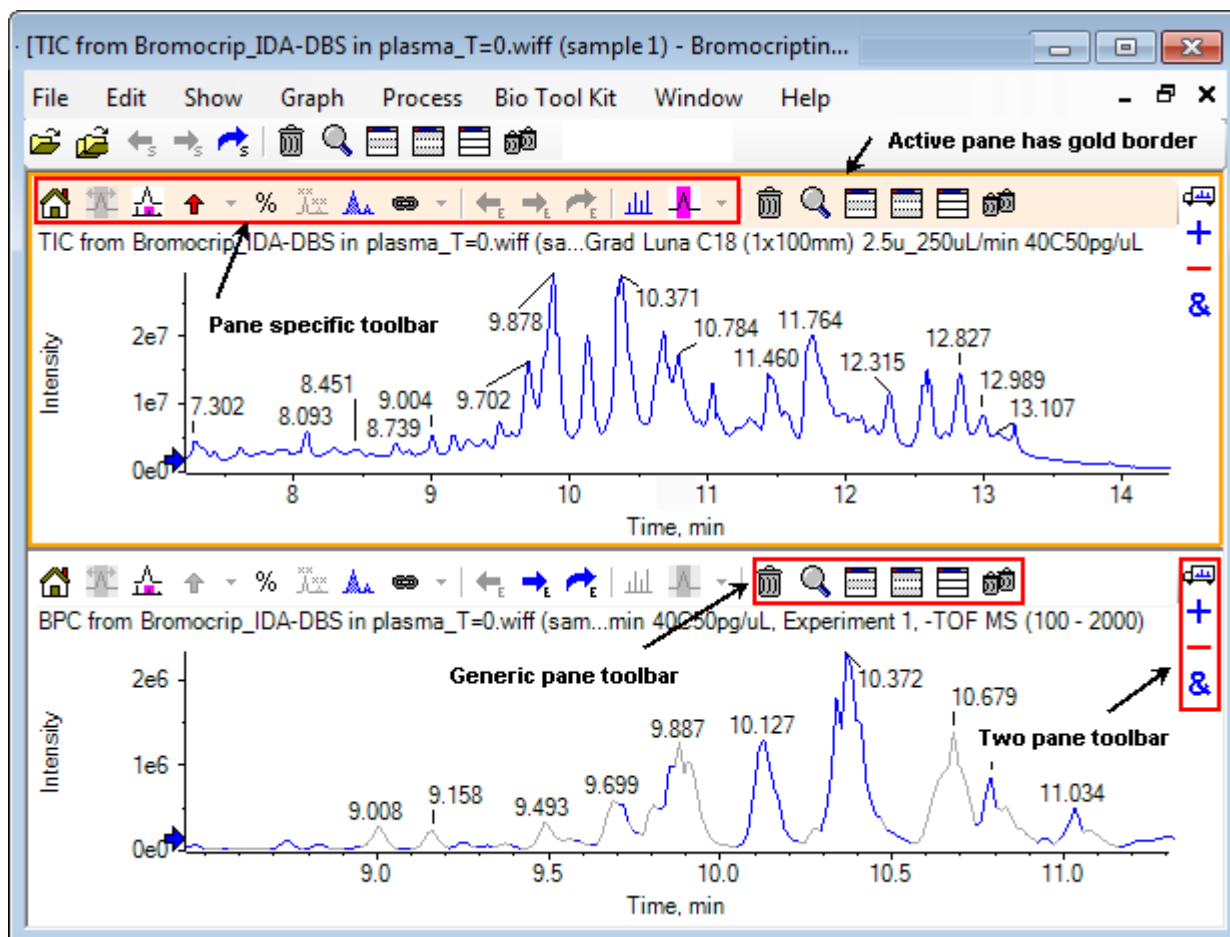
Alors que le logiciel utilise des fenêtres pour afficher et recevoir des informations, le composant de base de l'interface utilisateur est un volet. Une fenêtre peut contenir un ou plusieurs volets, mais seul un volet peut être actif à la fois. Les volets reçoivent des commandes des menus et des barres d'outils. Les menus et les barres d'outils offrent différentes façons de manipuler les volets ou les données qu'ils contiennent.

Les volets peuvent contenir des graphiques, tels que des spectres et des chromatogrammes, des cartes de chaleur ou des tableaux, ainsi que des vues plus spécialisées. Les opérations de traitement types permettent de créer des volets pour afficher des informations ou d'utiliser les données affichées dans un volet. Chaque volet contient des outils standard à un ou deux

volets. La plupart des volets sont dotés d'outils supplémentaires qui leur sont propres. Les outils supplémentaires permettent d'accéder aux commandes les plus courantes.

Un exemple de fenêtre standard est affiché à la [Illustration D-2](#). La fenêtre contient deux volets, dont un volet actif, le chromatogramme, identifié par une bordure colorée et une barre d'outils.

**Illustration D-2 : Exemple de volets dans une fenêtre**




Les opérations courantes relatives aux volets sont résumées dans les sections [Barre d'outils du volet générique](#) et [Barre d'outils à deux volets](#). Les opérations spécifiques relatives aux volets sont résumées dans la section [Graphiques](#).






### Barre d'outils du volet générique

Cliquez sur une icône pour utiliser les opérations génériques à volet unique.

**Tableau D-1 : Icônes de la barre d'outils du volet générique**

Icône	Nom (infobulle)
	Supprime ce volet

**Tableau D-1 : Icônes de la barre d'outils du volet générique (suite)**

Icône	Nom (infobulle)
	Développe le volet actif pour remplir la fenêtre
	Masque ce volet
	Masque les autres volets
	Affiche tous les volets actuellement masqués
	Supprime les autres volets (maintenez la touche Ctrl enfoncée pour supprimer uniquement les volets situés après celui-ci)

---

**Remarque :** Des icônes similaires sont également disponibles dans la barre d'outils principale au-dessous de la barre de menu. Cliquer sur l'une des icônes dans la barre d'outils principale du volet actif a le même effet que de cliquer sur l'icône dans le volet actif. Cette barre d'outils peut être utile si le volet actif a été redimensionné et que certaines icônes ne sont pas visibles.

---

### Supprime ce volet

Si plusieurs volets sont ouverts, utilisez cette icône pour supprimer le volet correspondant. Si un seul volet est ouvert, l'icône est alors indisponible.

### Développe le volet actif pour remplir la fenêtre

Utilisez cette icône pour développer le volet et renseigner toute la fenêtre ou pour rétablir le volet à sa taille d'origine. Si la fenêtre comporte plusieurs volets, cette icône vous permet alors d'en activer un temporairement.

Un onglet distinct est affiché en haut de la fenêtre pour chaque volet. Cliquez sur l'onglet approprié pour basculer entre les volets.

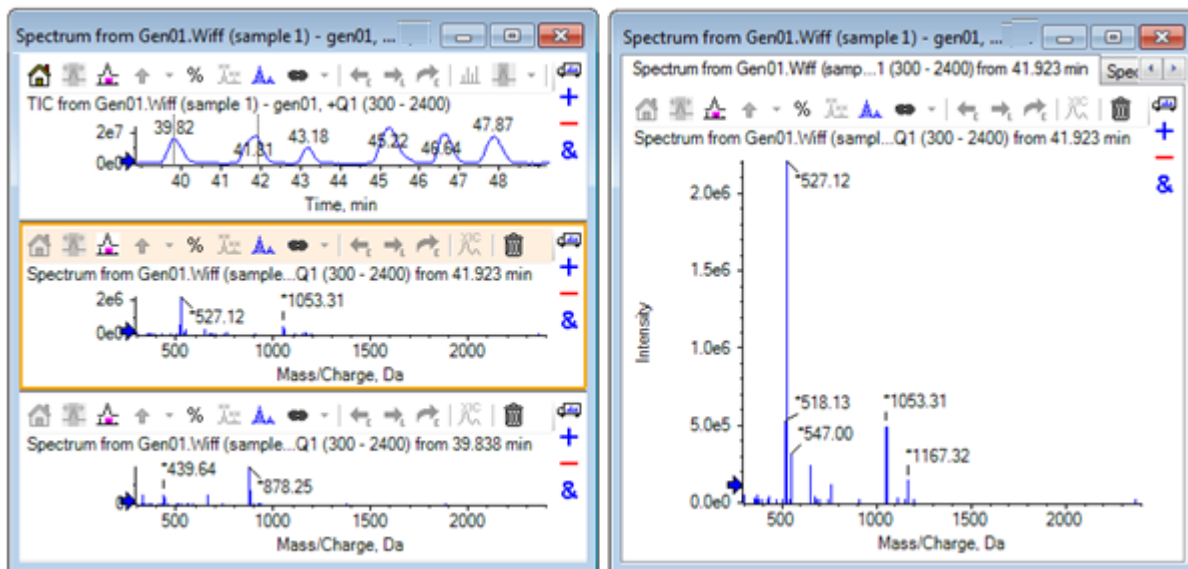
---

**Remarque :** Si les titres des volets sont longs, tous les onglets risquent de ne pas être visibles. Utilisez les touches fléchées à droite des onglets pour les faire défiler. Cliquez à nouveau sur l'icône pour rétablir la vue d'origine qui affiche tous les volets.

---



### Illustration D-3 : Exemple de volet développé



#### Masque ce volet

Utilisez cette icône pour masquer le volet correspondant afin que les autres volets présents dans la fenêtre remplissent l'espace disponible. Cette icône est utile lorsque vous souhaitez afficher un sous-ensemble des volets, mais ne souhaitez pas fermer les autres volets de façon permanente.

#### Masque les autres volets

Utilisez cette icône pour masquer tous les volets, sauf le volet correspondant. L'effet est relativement semblable à celui obtenu lorsque vous cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre** car, dans les deux cas, seul le volet correspondant reste et remplit l'espace disponible. La différence se remarque lorsqu'un autre volet est ensuite créé. Dans le cas du volet développé, ce nouveau volet devient actif et vient remplir l'espace disponible. Dans le cas des volets masqués, les deux volets (celui qui était actif à l'origine et le nouveau) sont tous deux visibles.

#### Affiche tous les volets actuellement masqués

Utilisez cette icône pour afficher tous les volets qui ont été masqués.

#### Supprime les autres volets





Si la touche Ctrl n'est pas maintenue enfoncée, la sélection de cette icône supprime tous les volets de la fenêtre, à l'exception du volet correspondant. Cette option est utile pour nettoyer et commencer un retraitement de l'échantillon. Tous les volets actuellement masqués sont également supprimés.

Si la touche Ctrl est maintenue enfoncée, seuls les volets qui se trouvent après le volet correspondant sont supprimés. Cette option est utile lorsque de nombreux volets sont ouverts et que seuls certains volets initiaux sont nécessaires. Dans ce cas, les volets masqués ne sont pas supprimés.

### Barre d'outils à deux volets

Faites glisser l'icône pour utiliser les opérations à deux volets (la disponibilité dépend du type de volet). Le volet source est celui qui contient l'icône sélectionnée. Le second volet correspond au volet cible.

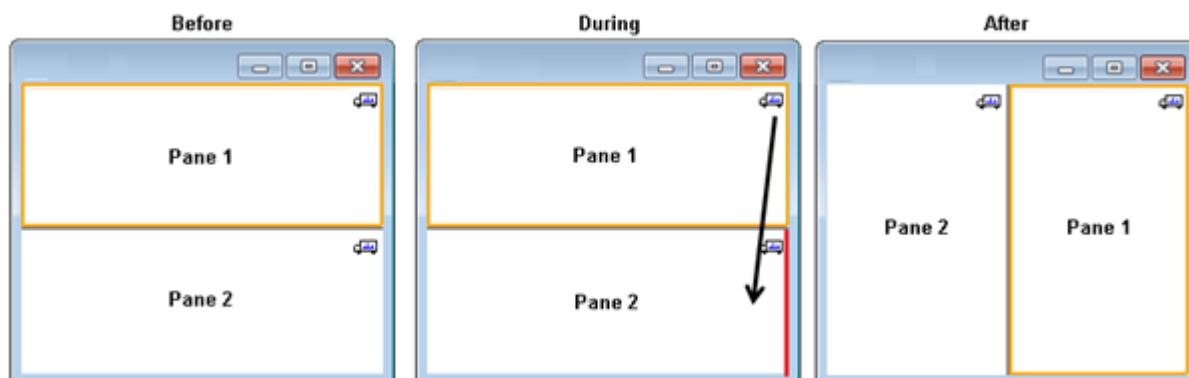
**Tableau D-2 : Icônes de la barre d'outils à deux volets**

Icône	Nom (infobulle)
	Glisser-déposer pour réorganiser les volets
	Faire glisser vers un autre graphique pour ajouter les données actives aux données actives de l'autre graphique. (Maintenez la touche Ctrl enfoncée pour ajouter les données actives à tous les ensembles de données de l'autre graphique.)
	Faire glisser vers un autre graphique pour soustraire les données actives des données actives du graphique cible (Maintenez la touche Ctrl enfoncée pour soustraire les données de tous les ensembles de données du graphique cible. Maintenez la touche Maj enfoncée pour conserver les valeurs négatives.)
	Faire glisser vers un autre graphique pour superposer les données actives dans le graphique cible. (Maintenez la touche Ctrl enfoncée pour superposer tous les ensembles de données, et pas uniquement l'ensemble actif.)

### Glisser-déposer pour réorganiser les volets

Cette icône s'affiche dans le coin supérieur droit de chaque volet et est utilisée pour modifier les positions relatives des volets. Cliquez sur l'icône dans un volet, puis faites-la glisser vers le haut, le bas, la gauche ou la droite d'un deuxième volet. Selon l'endroit où le bouton de la souris est relâché, le premier volet change de position par rapport au second. Lorsque le curseur est déplacé, l'un des côtés du second volet est mis en surbrillance en rouge pour indiquer l'endroit où le premier volet est placé. La [Illustration D-4](#) affiche le résultat du glissement de cette icône du volet supérieur vers la partie droite du volet inférieur.

**Illustration D-4 : Résultat du glissement de l'icône du volet supérieur vers la partie droite du volet inférieur**



---

**Remarque :** Les volets peuvent être déplacés d'une fenêtre à une autre.

---

### **Faire glisser vers un autre graphique pour ajouter les données actives aux données actives de l'autre graphique**

Utilisez cette icône pour rassembler deux ensembles de données point par point. Les données source (volet dans lequel vous avez initialement cliqué) sont ajoutées aux données cible (volet dans lequel vous avez relâché l'icône). Le titre des données modifiées est actualisé pour indiquer qu'il a été modifié.

---

**Remarque** : Seuls deux ensembles de données du même type peuvent être additionnés. Par exemple, vous ne pouvez pas ajouter un spectre à un chromatogramme.

---

**Remarque** : Si le graphique cible contient plusieurs tracés superposés, par défaut, les données source sont ajoutées uniquement aux données cible actives. Si vous appuyez sur la touche Ctrl, la source est ajoutée à tous les ensembles de données dans la cible.

---

### **Faire glisser vers un autre graphique pour soustraire les données actives des données actives de la cible**

Utilisez cette icône pour soustraire les données source aux données cible. Cette icône est très utile pour soustraire le bruit de fond d'un spectre de masse.

---

**Remarque** : Si le graphique cible contient plusieurs tracés superposés, par défaut, les données source sont soustraites uniquement des données cible actives. Si vous appuyez sur la touche Ctrl, la source est soustraite de tous les ensembles de données dans la cible.

---

**Conseil !** Normalement, les éventuels points de données pour lesquels l'intensité dans la source est plus importante que dans la cible ne sont pas conservés. Cela signifie que les valeurs y négatives sont écartées. Si vous appuyez sur la touche Shift (Maj), les points pour lesquels l'intensité est négative sont conservés.

---

### **Faire glisser vers un autre graphique pour superposer sur les données actives dans le graphique cible**

Utilisez cette icône pour superposer les données actives dans le graphique source sur le graphique cible. Une fois l'opération terminée, le graphique cible contiendra une nouvelle série avec une copie des données cible.

---

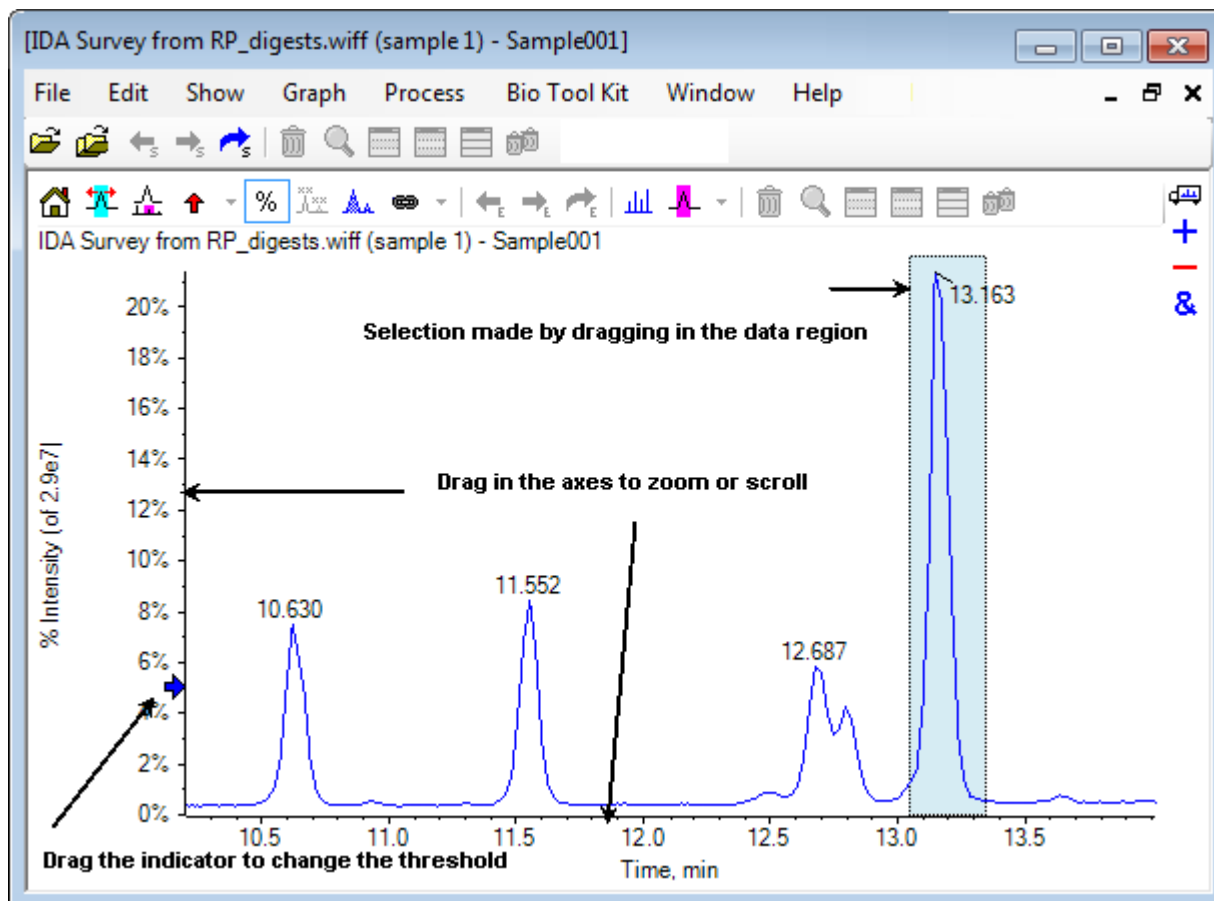
**Remarque** : Si le graphique source contient plusieurs tracés superposés, par défaut, seule une copie de ses données actives est déplacée vers le graphique cible. Maintenez la touche Ctrl enfoncée pour superposer une copie de tous les ensembles de données du graphique source sur le graphique cible.

---

## **Graphiques**

Les graphiques sont des volets qui permettent l'interaction et l'affichage des données. Plusieurs opérations sont communes à tous les graphiques, tandis que d'autres dépendent du type de données affichées.

### Illustration D-5 : Graphiques















Les commandes génériques sont résumées comme suit :

- Les opérations d'agrandissement et de défilement sont exécutées en faisant glisser le curseur dans la zone de l'axe des x ou des y du graphique. Pour réinitialiser l'axe sur la plage d'origine, vous devez double-cliquer et pour rétablir le graphique sur la vue précédente (annulation de l'agrandissement et du défilement), vous devez cliquer dans l'axe tout en appuyant sur la touche **Shift (Maj)**.
- Vous pouvez positionner un indicateur de seuil en le faisant glisser. Le seuil détermine généralement les pics qui sont marqués et il est parfois utilisé pour déterminer les pics traités.
- Effectuez les sélections en les faisant glisser dans la zone de données. Les sélections sont utilisées pour définir une partie des données à utiliser ou à traiter. Sélectionnez plusieurs zones en appuyant sur la touche **Shift (Maj)** tout en faisant glisser la souris. Appuyez sur la touche **Ctrl** pour effectuer des sélections dans les axes x et y.

## Barre d'outils spécifique au graphique

Tableau D-3 : Icônes de la barre d'outils spécifique au graphique

Icône	Nom (infobulle)
	Rétablit le graphique agrandi à son affichage initial
	Agrandit la sélection pour un affichage intégral
	Afficher le graphique « Zoom » (pour le suivi de zoom actuel). Reportez-vous à la <a href="#">Illustration D-6</a> .
	Ajoute des marqueurs fléchés pour les pics sélectionnés
%	Utiliser l'axe des y (%).
	Marquer tous les tracés superposés
	Remplir les pics
	Relie l'axe des x du graphique à d'autres (avec les mêmes unités) dans la fenêtre (maintenez la touche Ctrl pour l'appliquer à tous les graphiques en cours)
	Modifie les données pour utiliser l'expérience précédente
	Modifie les données pour utiliser l'expérience suivante
	Modifie les données pour utiliser une expérience sélectionnée
	Affiche un spectre pour la sélection
	Définir la plage de soustraction du bruit de fond

**Remarque** : Les six dernières icônes de cette barre d'outils, commençant par l'icône Supprime ce volet, sont décrites dans la section [Barre d'outils du volet générique](#).

### Rétablit le graphique agrandi à son affichage initial

Si le tracé a été agrandi, utilisez cette icône pour revenir à la vue initiale, à savoir la vue dans laquelle les axes des x et des y présentent leurs plages par défaut et dans laquelle toutes les données disponibles sont visibles. Un double-clic sur l'axe des x permet de revenir à la vue initiale du graphique. Un double-clic sur l'axe des y renvoie cet axe seul à sa plage maximale.

### Agrandit la sélection pour un affichage intégral

Utilisez cette icône pour agrandir le tracé afin que la zone sélectionnée remplisse la totalité de l'espace disponible. Avant de sélectionner cette icône, faites glisser le curseur à l'intérieur du tracé pour faire une sélection. Vous pouvez également agrandir la vue en faisant glisser le curseur directement sur l'axe des x (ou l'axe des y) du tracé.

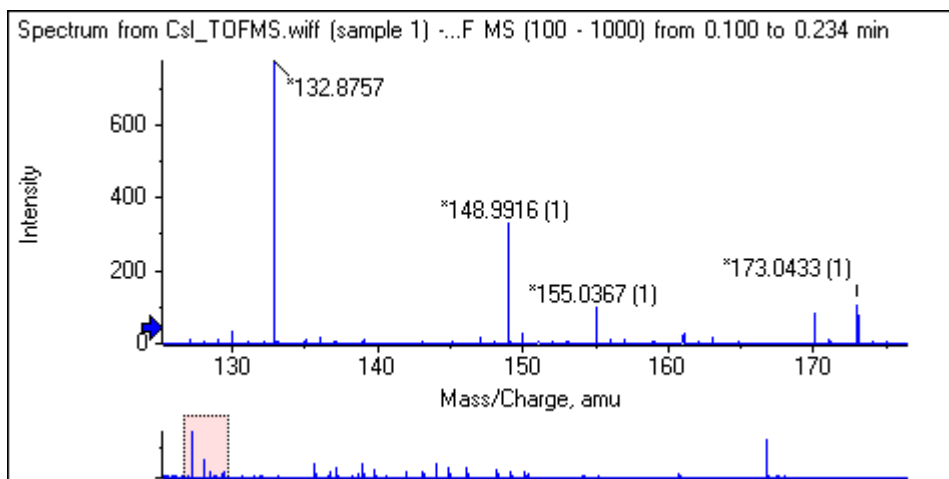
### Afficher le graphique « Zoom » (pour le suivi de zoom actuel)

Utilisez cette icône pour afficher une petite copie du graphique sous le graphique principal comme indiqué dans la [Illustration D-6](#). Cet aperçu du graphique montre toujours la totalité de la plage disponible et indique la zone du graphique principal qui a été agrandie à l'aide d'une sélection rose. Quand le graphique principal a été agrandi, cette sélection se met à jour en conséquence.

Lorsque la sélection de pics est déplacée vers un nouvel emplacement, le graphique principal défile, comme requis. Effectuez un déplacement près du bord droit ou gauche de la sélection pour régler la largeur. Dans ce cas, le graphique principal est agrandi si nécessaire.

Cette fonctionnalité est utile pour les spectres de masse haute résolution, car il est souvent nécessaire de les agrandir assez fortement pour observer les détails requis. L'aperçu du graphique vous permet encore de garder une trace de l'emplacement où se trouve la zone agrandie par rapport à la totalité de la plage de masses.

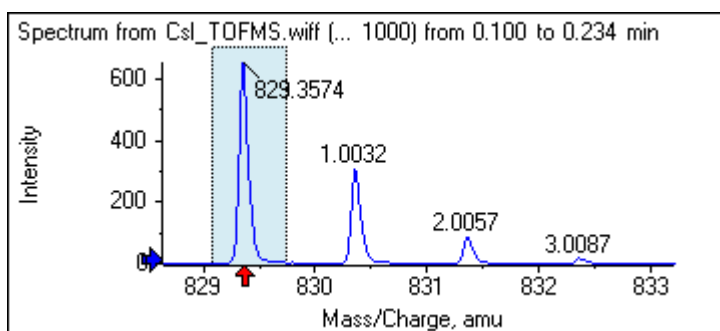
### Illustration D-6 : Afficher un aperçu du graphique



### Ajoute des marqueurs fléchés pour les pics sélectionnés

Utilisez cette icône pour ajouter un marqueur fléché au pic le plus grand dans la zone du graphique en cours de sélection. La [Illustration D-7](#) affiche le résultat du clic sur cette icône lorsque le pic 829 (approximatif) est sélectionné comme indiqué.

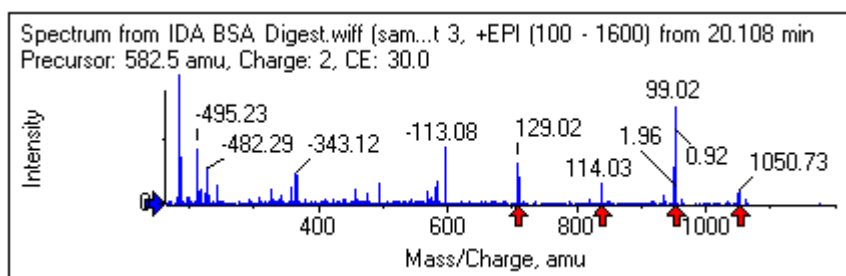
### Illustration D-7 : Ajouter un seul marqueur fléché



Les flèches agissent comme des points de référence dans les données. Par défaut, les pics qui ne sont pas proches d'une flèche sont marqués de leur distance à la flèche la plus proche. Le pic proche de la flèche ayant la valeur  $x$  la plus importante est marqué de la valeur  $x$  réelle. Les pics proches d'une flèche autre que la dernière sont marqués par rapport à la flèche ayant la valeur  $x$  la plus élevée. Dans la [Illustration D-7](#), le pic à environ 829 Da est marqué avec sa valeur  $m/z$  réelle et les pics isotopiques sont marqués avec leur distance par rapport à ce pic. Les pics à gauche de la flèche (non illustrés) comporteraient des valeurs marquées comme négatives.

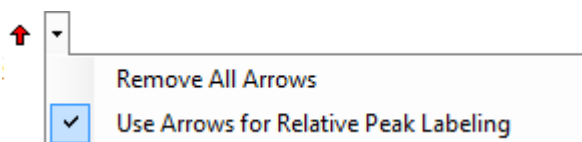
Les flèches sont le plus souvent utilisées avec les spectres et constituent une façon commode de rechercher des différences de masses attendues comme dans le cas d'isotopes, de pertes de masse dans les spectres MS/MS, etc. La [Illustration D-8](#) affiche le spectre MS/MS d'un peptide dans lequel des flèches ont été ajoutées à des valeurs correspondant à des pertes neutres de résidus d'acides aminés. Par exemple, le pic marqué 99,02 pourrait être une perte de valine du pic à 1050,73 Da, le prochain pic marqué 114,03 pourrait être une perte additionnelle d'asparagine, etc. Le pic marqué -113,08 pourrait être une perte de leucine ou d'isoleucine du pic marqué 129,02 (avec un rapport  $m/z$  réel proche de 709 Da).

#### Illustration D-8 : Ajouter plusieurs marqueurs fléchés



Si ce marquage du pic parent n'est pas utilisé, désactivez l'élément de menu **Use Arrows for Relative Peak Labeling**, représenté dans la [Illustration D-9](#). Dans ce cas, les flèches sont utilisées pour marquer les pics présentant un intérêt particulier.

#### Illustration D-9 : Menu Add Arrow Marker



Vous pouvez faire glisser une flèche vers un nouvel emplacement. Si vous la faites glisser dans l'aire du tracé, ceci annule l'opération de déplacement. Si vous la faites glisser à l'extérieur du graphique, la flèche est supprimée. Vous pouvez supprimer toutes les flèches en sélectionnant **Remove All Arrows** dans le menu affiché à la [Illustration D-9](#).

#### Utiliser l'axe des y (%)

Cette icône détermine la mise à l'échelle de l'axe des y. Quand cette option est sélectionnée, les tracés superposés sont mis à l'échelle de façon que la valeur maximum de chaque tracé

## Tutoriel pour Explorer

---

soit de 100 %. L'utilisation de l'axe des y en pourcentage est commode si les amplitudes absolues des tracés superposés sont très différentes.

### Marquer tous les tracés superposés

Par défaut, quand de nombreux tracés sont superposés, seul le tracé actif est marqué. Cliquez sur cette icône pour marquer tous les tracés. Cliquez à nouveau sur l'icône pour supprimer tous les marqueurs et revenir à la vue d'origine.

### Remplir les pics

Cliquez sur cette icône pour remplir les pics pour les données actives en utilisant alternativement des remplissages sombres et clairs. Cette fonction est utile pour afficher le début et la fin exacts des pics. Cliquez à nouveau sur l'icône pour supprimer le remplissage et revenir à la vue d'origine.

### Relie l'axe des x du graphique à d'autres (avec les mêmes unités) dans la fenêtre

Les axes de plusieurs graphiques peuvent être liés les uns aux autres de sorte que quand un axe d'un graphique est agrandi, les autres s'ajustent automatiquement pour afficher la même plage. Cette fonction peut être utile pour comparer les données de ces graphiques. Il est également possible de superposer les ensembles de données dans le même graphique. Toutefois, cette action n'est pas toujours souhaitée.

Cliquez sur l'icône **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** dans chacun des graphiques à associer. Si vous maintenez la touche **Ctrl** enfoncée pendant que vous cliquez sur l'icône, vous liez tous les graphiques en cours avec les mêmes unités d'axe des x dans la même fenêtre comme graphique actif. Par exemple, si trois spectres sont visibles, que vous appuyez sur la touche **Ctrl** et que vous cliquez sur l'icône **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** (Relie l'axe des x du graphique à d'autres (avec les mêmes unités) dans la fenêtre) de l'un d'eux, les trois spectres sont reliés les uns aux autres.

---

**Remarque** : Si un nouveau spectre est généré par la suite, il n'est pas relié aux autres. Pour associer le nouveau spectre, cliquez sur l'icône **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** associée.

---

Par défaut, seuls les axes des x des graphiques sont liés. Dans ce cas, quand un graphique est agrandi manuellement, les autres vont automatiquement agrandir leurs axes des y de façon que les pics présents dans la vue remplissent l'espace disponible.

Pour dissocier un graphique lié, cliquez sur l'icône **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** (Relie l'axe des x du graphique à d'autres (avec les mêmes unités) dans la fenêtre) dans le graphique approprié. Appuyez en même temps sur la touche **Ctrl** pour dissocier l'ensemble des graphiques avec les mêmes unités de l'axe des x dans la même fenêtre.

### Modifie les données pour utiliser l'expérience suivante

Si les données actives pour le graphique sont associées à une expérience spécifique autre que la dernière, cette icône remplace les données par des données du même type mais pour l'expérience suivante.



Par exemple, si le TIC relatif à l'expérience 2 est actif, cliquez sur cette icône pour passer au TIC relatif à l'expérience 3. Si le spectre d'une période donnée est actif pour l'expérience 2, cliquez sur cette icône pour passer à un spectre de la même période pour l'expérience 3.

### Modifie les données pour utiliser l'expérience précédente

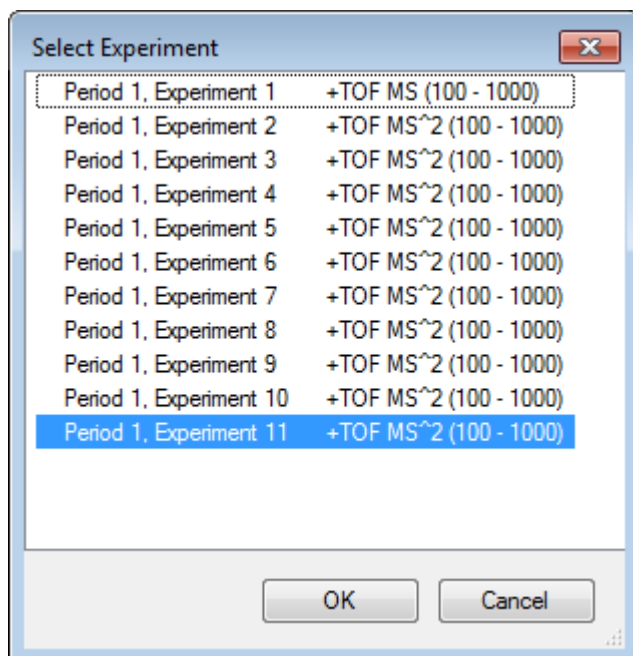
Si les données actives pour le graphique sont associées à une expérience spécifique autre que la première, cette icône remplace les données par des données du même type mais pour l'expérience précédente.

Par exemple, si le TIC relatif à l'expérience 3 est actif, cliquez sur cette icône pour passer au TIC relatif à l'expérience 2. Si le spectre d'une période donnée est actif pour l'expérience 3, cliquez sur cette icône pour passer à un spectre de la même période pour l'expérience 2.

### Modifie les données pour utiliser une expérience sélectionnée

Utilisez cette icône pour sélectionner une expérience spécifique plutôt que de faire défiler les expériences une à une. Cliquez sur l'icône pour ouvrir une boîte de dialogue qui répertorie toutes les expériences disponibles. L'échantillon actif est mis en surbrillance. Cliquez sur une expérience dans la liste pour la sélectionner, puis cliquez sur **OK**. Reportez-vous à la [Illustration D-10](#).

### Illustration D-10 : Boîte de dialogue Select Experiment



### Affiche un spectre pour la sélection


Utilisez cette icône pour générer un spectre de masse selon une moyenne établie sur la plage de temps de la sélection en cours dans le graphique. Vous pouvez obtenir le même résultat en double-cliquant dans la sélection.

### Définir la plage de soustraction du bruit de fond

Utilisez cette icône pour effectuer une soustraction automatique du bruit de fond pour les spectres générés à partir du chromatogramme.

### Barre d'outils spécifique au spectre

Tableau D-4 : Icônes de la barre d'outils spécifique au spectre

Icône	Nom (infobulle)
	Affiche un XIC pour la sélection

---

**Remarque** : Les onze premières icônes de cette barre d'outils, commençant par l'icône Rétablit le graphique agrandi à son affichage initial, sont décrites dans la section [Barre d'outils spécifique au graphique](#).

---

**Remarque** : Les six dernières icônes de cette barre d'outils, commençant par l'icône Supprime ce volet, sont décrites dans la section [Barre d'outils du volet générique](#).

---

### Affiche un XIC pour la sélection

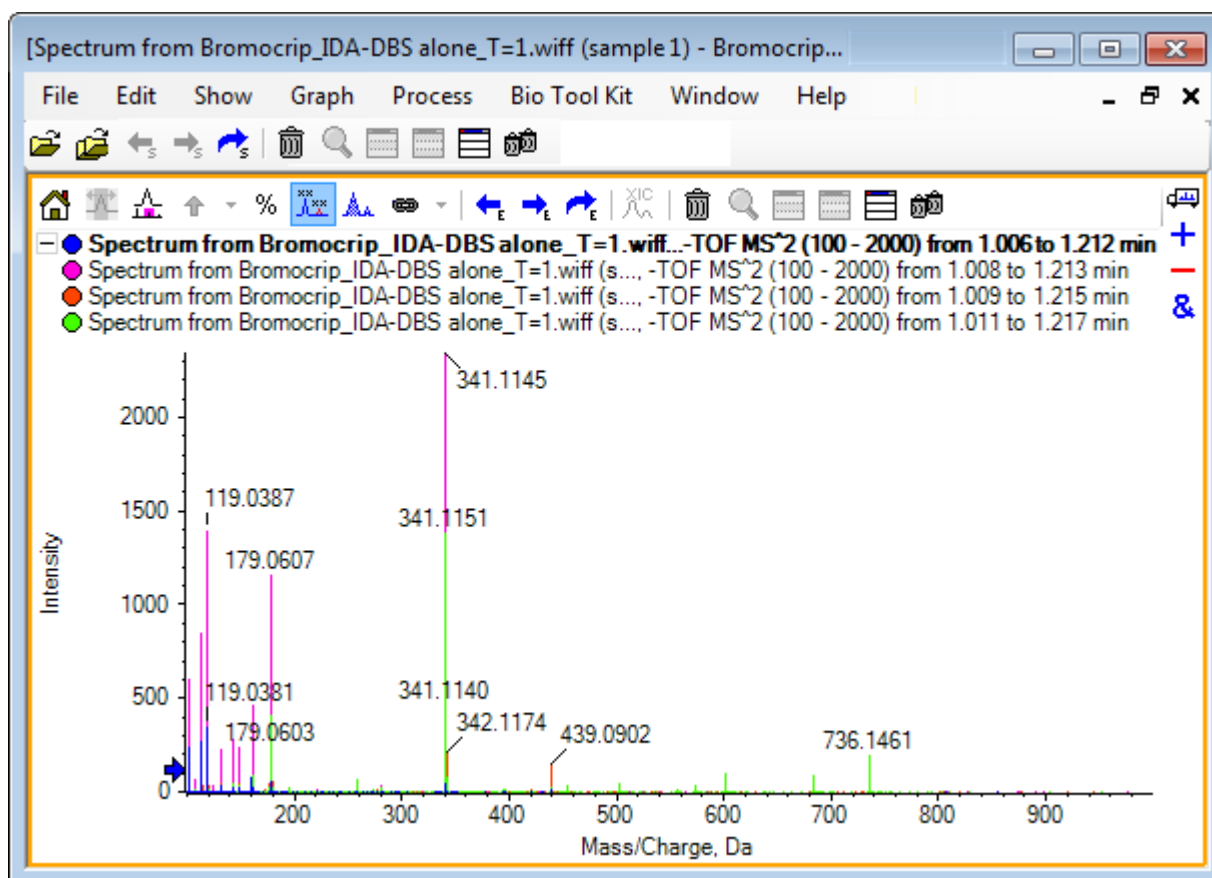
Utilisez cette icône pour générer une chromatographie à échange d'ions (XIC) cumulée sur la gamme de masses de la sélection en cours dans le graphique.

## Superpositions

Les graphiques peuvent contenir différents tracés, appelés superpositions, qui partagent les mêmes axes de sorte qu'il est possible de les comparer facilement. Il est possible de les générer en faisant glisser l'icône à deux volets appropriée, par exemple, **Faire glisser vers un autre graphique pour superposer les données actives dans le graphique cible** et elles sont produites automatiquement via des commandes de création de volet. Consultez [Chromatogrammes et spectres](#).

Dans la [Illustration D-11](#), le graphique contient quatre spectres avec l'icône **Marquer tous les tracés superposés** sélectionnée. La zone d'en-tête du graphique affiche les titres des deux spectres et des cercles en couleur indiquant la couleur du tracé. Le tracé actif est affiché en caractères gras. Ce tracé est la cible pour toute opération de traitement, comme les données de seuil, le lissage, etc., et devrait normalement être le seul marqué. Si vous cliquez sur l'icône à gauche du titre, celle-ci est modifiée et seul le titre du tracé actif est affiché. Cette fonction est utile en cas de superpositions multiples. Cliquez à nouveau sur l'icône pour inverser le processus. S'il y a beaucoup de tracés et que vous déplacez le curseur sur les titres, le curseur se transforme en flèche à double sens et agit comme une barre de défilement lorsque vous le déplacez de sorte que tous les titres sont accessibles.

**Illustration D-11 : Graphique contenant quatre spectres avec l'icône Marquer tous les tracés superposés sélectionnée**



Il existe plusieurs façons de modifier le tracé actif :

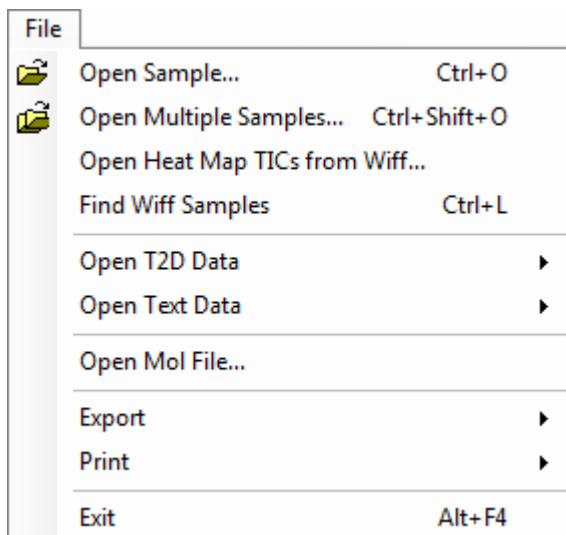
- Cliquez sur le cercle de couleur à côté du titre.
- Cliquez sur le titre lui-même.
- Cliquez sur un point de données dans le tracé (et non sur le tracé lui-même).

Si vous cliquez sur le bouton droit de la souris dans un graphique contenant des superpositions, un menu contextuel est affiché et propose des commandes que vous pouvez utiliser afin de modifier visuellement les tracés affichés. Les options **Remove Active Trace** et **Remove All Traces Except Active** fonctionnent comme prévu.

## Ouvrir des fichiers

Comme illustré dans la [Illustration D-12](#), le logiciel peut ouvrir différents types de fichiers de données et dispose de commandes pour ouvrir un ou plusieurs échantillons.

### Illustration D-12 : Menu File

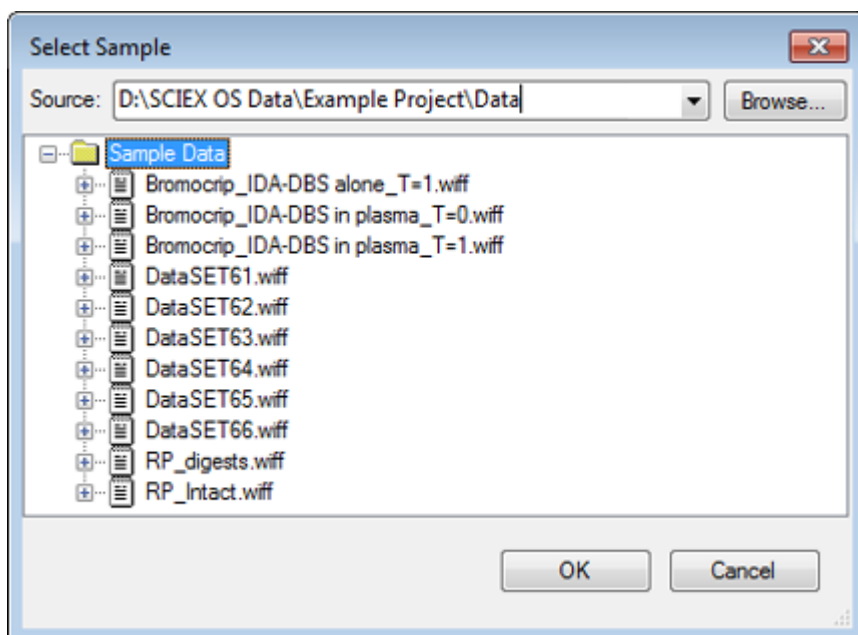


### Ouvrir un fichier d'échantillon unique

L'option **Open Sample** ouvre la boîte de dialogue **Select Sample**. Reportez-vous à la [Illustration D-13](#).

Cette boîte de dialogue permet de sélectionner un fichier unique. La vue générée dépend de la commande sélectionnée : un seul fichier .scan affichant un spectre ou un chromatogramme en courant ionique total (TIC) et plusieurs fichiers de balayage .wiff affichant un TIC (la somme de toutes les expériences, s'il y en a plusieurs).

### Illustration D-13 : Boîte de dialogue Select Sample



Cliquez sur l'icône à gauche du fichier .wiff pour afficher tous les échantillons dans le fichier, puis sélectionnez le nom du fichier requis. S'il n'y a qu'un seul échantillon dans le fichier, sélectionnez le nom du fichier, puis cliquez sur **OK**.

### Ouvrir plusieurs fichiers d'échantillon

Les options **Open Multiple Samples** et **Open Heat Map TICs from Wiff** permettent d'ouvrir la boîte de dialogue **Select Samples**. Reportez-vous à la [Illustration D-14](#).

Le volet de gauche correspond à la boîte de dialogue **Open** qui permet de parcourir les dossiers et de spécifier les fichiers, et le volet de droite indique les fichiers qui seront ouverts lorsque vous cliquerez sur **OK**. Les échantillons peuvent être transférés de la gauche vers la droite de la manière suivante :

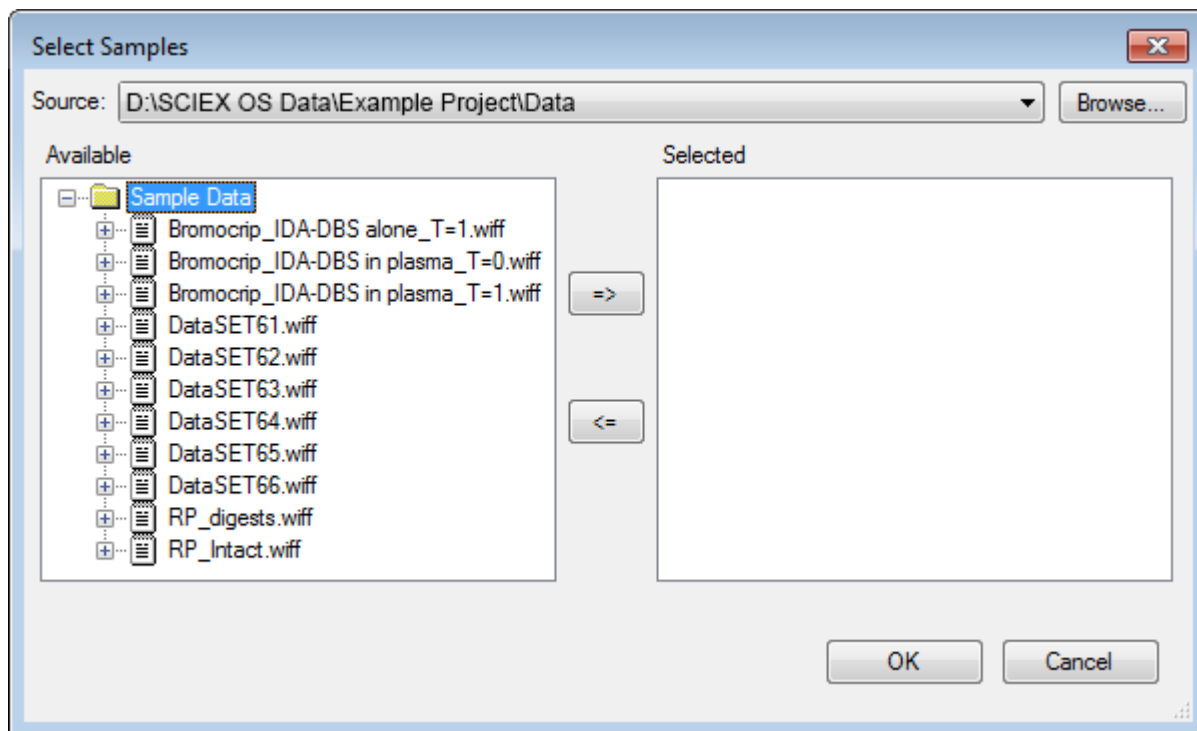
- Développez le fichier .wiff, sélectionnez l'échantillon, puis cliquez sur la flèche pointant vers la droite.
- Développez le fichier .wiff, sélectionnez l'échantillon, puis faites-le glisser vers le volet de droite.
- Développez le fichier .wiff, puis double-cliquez sur l'échantillon.

Si le fichier contient plusieurs échantillons, vous pouvez alors tous les transférer en sélectionnant le fichier .wiff et en cliquant sur la flèche pointant vers la droite, ou en sélectionnant le fichier .wiff, puis en le faisant glisser vers le volet de droite.

Les échantillons peuvent être transférés de la droite vers la gauche de la manière suivante :

- Développez le fichier .wiff, sélectionnez l'échantillon, puis cliquez sur la flèche pointant vers la gauche.
- Développez le fichier .wiff, sélectionnez l'échantillon, puis faites-le glisser vers le volet de gauche.
- Double-cliquez sur l'échantillon.

Illustration D-14 : Boîte de dialogue Select Samples



## Chromatogrammes et spectres

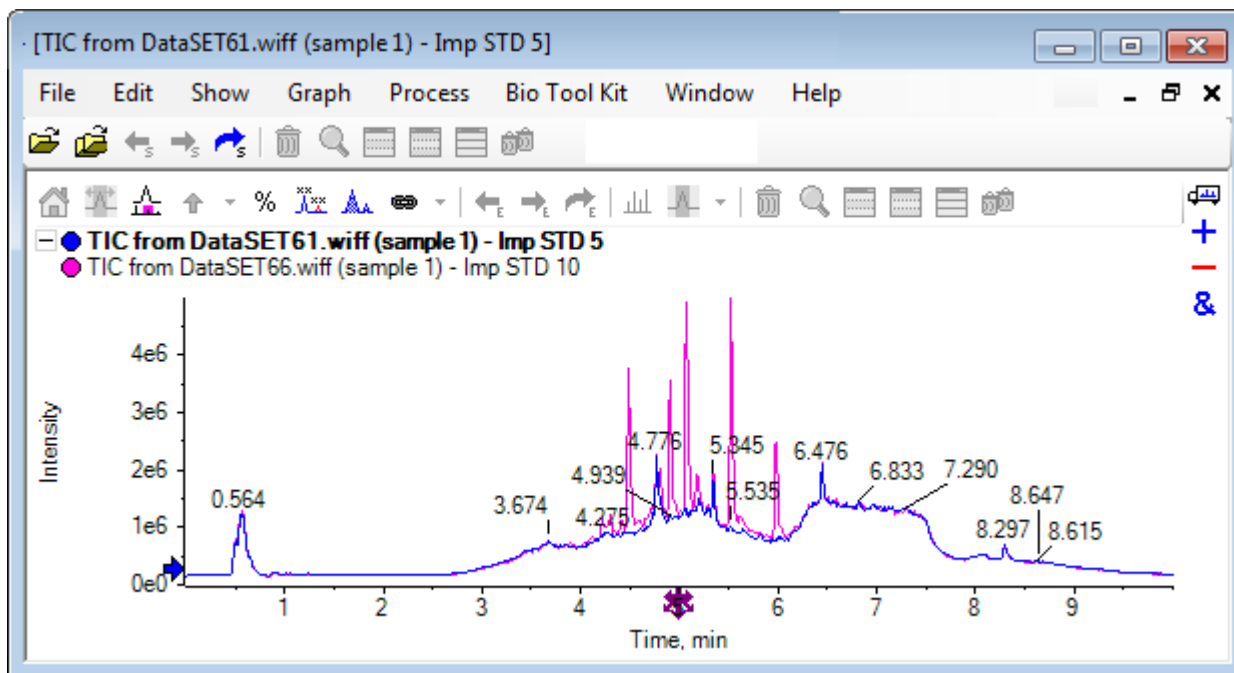
Les vues Total Ion Chromatogram (TIC), Spectra et Extracted Ion Chromatogram (XIC) sont les vues de données les plus utilisées pour explorer et examiner des données. Le logiciel fournit des liens entre ces vues de données afin que vous puissiez générer rapidement des spectres, puis des XIC pour déterminer si les pics dans les spectres proviennent d'un ou de plusieurs pics chromatographiques.

### Chromatogramme en courant ionique total (TIC)

Il s'agit de la vue par défaut qui s'affiche lorsqu'un fichier de balayage ou de balayage multiple .wiff est ouvert. Le TIC affiché correspond à un chromatogramme généré par l'addition des intensités de tous les ions de chaque spectre et par le tracé de la somme en tant que fonction du temps de rétention.

Si vous avez acquis l'échantillon à l'aide des expériences en boucle, le TIC affiché correspond aux sommes d'intensité des deux expériences et une flèche spécifique est tracée sur l'axe des x pour l'indiquer. Reportez-vous à la [Illustration D-15](#). Si vous double-cliquez sur l'indicateur, un nouveau volet indiquant les TIC individuels superposés pour chaque expérience s'affiche.

## Illustration D-15 : TIC



Si l'échantillon contient des données IDA, sélectionnez IDA Explorer, qui est une manière graphique d'afficher la masse et les temps de rétention des précurseurs sélectionnés, ou un TIC classique. Si l'option TIC classique est sélectionnée, les TIC distincts sont alors affichés pour l'exploration IDA et la somme dépendante des IDA.

Affichez les TIC à tout moment en cliquant sur **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** pour ouvrir une boîte de dialogue qui permet de sélectionner n'importe quelle expérience. La sélection de la période 1 affiche le TIC pour toutes les expériences, tandis que les autres entrées correspondent aux TIC individuels. Appuyez sur la touche **Shift** ou **Ctrl** et maintenez-la enfoncée, puis cliquez pour en sélectionner plusieurs.

## Spectres

Si un fichier contient un seul spectre, ce spectre s'affiche lorsque le fichier est ouvert.

Pour les données comportant plusieurs balayages, générez les spectres à partir des chromatogrammes. Pour ce faire, effectuez une sélection dans le chromatogramme et double-cliquez à l'intérieur ou cliquez sur l'icône **Affiche un spectre pour la sélection**. Faites glisser le rectangle de sélection dans le chromatogramme pour mettre à jour le spectre qui va indiquer la nouvelle zone.

Sélectionnez plusieurs zones en appuyant sur la touche **Shift (Maj)** après avoir effectué la première sélection. Double-cliquez sur l'une de ces sélections ou cliquez sur l'icône **Affiche un spectre pour la sélection** pour générer un nouveau volet de spectre avec le spectre superposé.

Pour IDA, une invite à superposer tous les spectres dépendants ou à simplement afficher le premier spectre apparaît. Dans ce dernier cas, utilisez les touches fléchées gauche et droite pour afficher les autres spectres.

## Tutoriel pour Explorer

---

**Remarque** : Cette boîte de dialogue contient une case à cocher Only show again if the shift key is down.

---

Générez des spectres soustraction du bruit de fond de deux façons :

- Générez des spectres distincts pour les zones de pic et de bruit de fond, puis faites glisser l'icône à deux volets de soustraction du spectre de bruit de fond vers le spectre de pic.
- Définissez une zone de bruit de fond en faisant une ou deux sélections dans le chromatogramme et en cliquant sur l'icône **Définir la plage de soustraction du bruit de fond**. Tous les spectres générés lors de la définition d'une zone de bruit de fond sont automatiquement soustraits du bruit de fond. La zone de bruit de fond s'affiche dans le chromatogramme sous la forme d'un rectangle de sélection rouge pâle et vous pouvez la déplacer, ainsi que toute sélection de spectre, pour modifier les données affichées. Lorsqu'une zone de bruit de fond est définie, vous pouvez la supprimer en cliquant sur la flèche à côté de l'icône, puis en sélectionnant **Clear Subtraction Range**.

---

**Remarque** : Les marqueurs fléchés sont utiles dans les spectres, car les marqueurs de pics peuvent correspondre au pic le plus proche marqué d'une flèche, permettant ainsi de déterminer rapidement les masses des pertes ou des adduits. S'il y a plusieurs superpositions et que l'icône Marquer tous les tracés superposés est sélectionnée, chaque superposition est alors marquée par rapport à la flèche.

---

## Chromatogramme des ions extraits (XIC)

Un XIC peut être généré de deux façons :

- En cliquant sur **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)**.

Cette action ouvre une boîte de dialogue dans laquelle vous pouvez saisir des valeurs pour les masses de démarrage et d'arrêt ou les valeurs de centre et de largeur, en fonction du mode. Vous pouvez modifier cette action en ouvrant le menu contextuel. Pour ce faire, cliquez avec le bouton droit de la souris dans la boîte de dialogue. Le menu contextuel permet également d'accéder à d'autres commandes utiles, telles que la définition d'une largeur par défaut et l'importation ou l'exportation de la liste des masses. Les utilisateurs peuvent également définir des valeurs de masse constantes de sorte qu'elles sont automatiquement utilisées jusqu'à leur suppression.

- En faisant une ou plusieurs sélections dans un spectre, puis en double-cliquant sur l'un d'eux ou en cliquant sur l'icône **Affiche un XIC pour la sélection**.

Ces actions génèrent un XIC correspondant à chaque sélection. Par défaut, le programme détermine le plus grand pic dans chaque plage de sélection et définit automatiquement le XIC pour qu'il corresponde aux valeurs de masse basses et élevées de mi-hauteur du pic. Si vous appuyez sur la touche **Ctrl**, toute la largeur de la sélection est utilisée.

Dans les deux cas, un graphique contenant une superposition pour chaque sélection s'affiche. Les sélections se transforment en liaisons. Faire glisser les liaisons permet de mettre à jour les XIC.



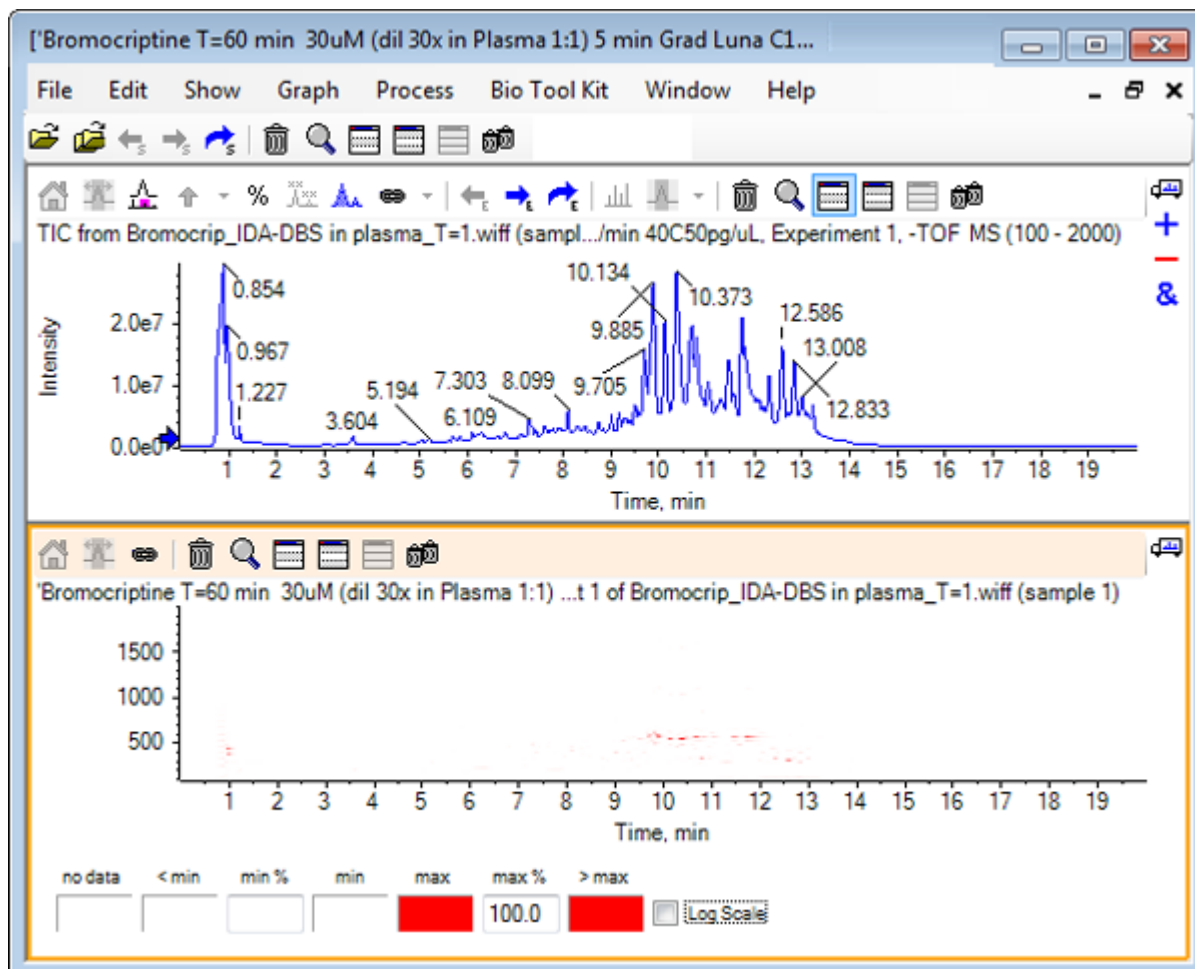
**Remarque** : Les XIC sont normalement calculés et affichés pour toute la plage chromatographique. Ces opérations peuvent être lentes surtout en cas de sélections multiples, et si les données sont générées par un instrument de haute résolution et qu'il contient de nombreux balayages. Une fonction utile consiste à définir les plages de XIC sur une fenêtre plus faible autour du temps de rétention du spectre utilisé pour les générer. Vous pouvez définir cette fonction dans l'onglet XIC de la boîte de dialogue qui s'affiche après avoir cliqué sur l'onglet **Edit > Options > XIC**.

---

## Graphiques de contour et cartes de chaleur

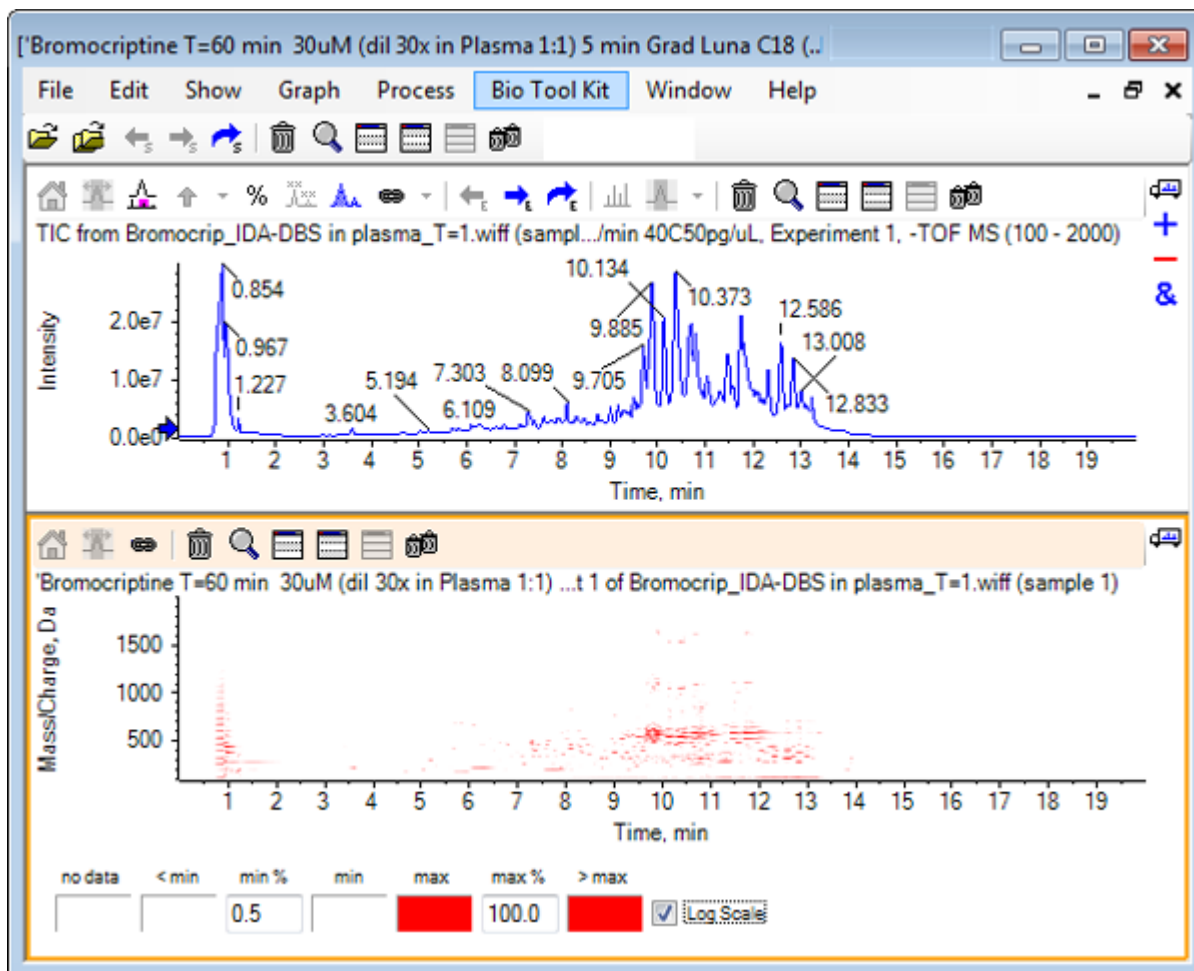
Un graphique de contour LC/MS (**Show > LC/MS Contour Pane**) affiche toutes les données d'un échantillon LC/MS dans un seul volet. L'exemple de la [Illustration D-16](#) illustre un TIC et la carte de contour correspondante, qui affiche les données sous la forme d'une carte du rapport  $m/z$  par rapport au temps de rétention avec une intensité à code couleur. Dans cet exemple, les contrôles de couleur sont également affichés, mais vous pouvez les masquer en cliquant avec le bouton droit de la souris dans la vue et en désactivant l'option **Show Appearance Control**. Étant donné que les graphiques de contour et les chromatogrammes sont sur le même axe des x, il est possible de les associer de sorte que l'agrandissement et le défilement affectent les deux vues de façon similaire à des fins de comparaison.

Illustration D-16 : TIC et carte de contour correspondante



Le contrôle de la couleur utilise une palette de 256 couleurs pour représenter les intensités dans la plage définie par **min%** et **max%**. Les intensités inférieures à **min%** sont tracées avec **< min** et celles supérieures à **max%** sont tracées avec **> max**. Si les couleurs utilisées pour les champs **< min** et **no data** sont identiques (comme dans cet exemple), tous les points de données inférieurs à **min%** disparaissent. Il s'agit d'une forme de seuillage visuel qui permet de simplifier le tracé comme illustré à la [Figure 1-11](#), où la valeur **min%** a été relevée à 0,5 %. Pour plus d'informations sur les contrôles de la couleur, consultez le *Guide de l'utilisateur du système*.

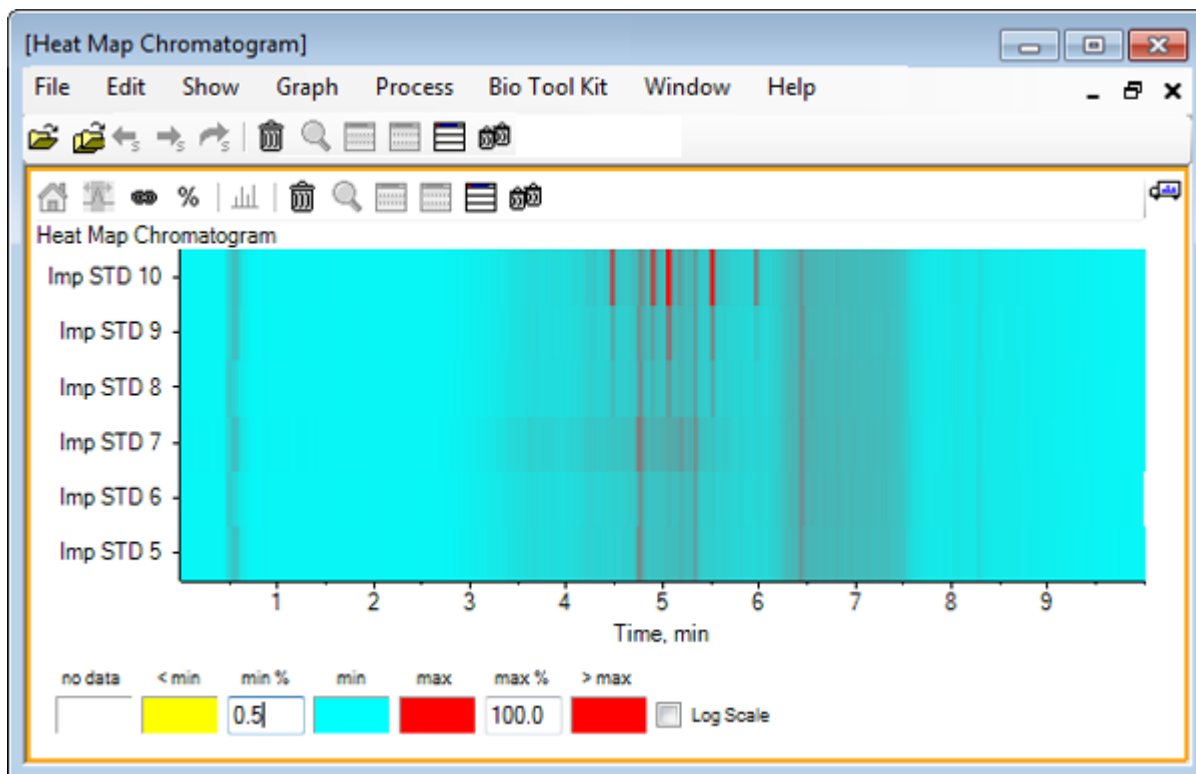
Illustration D-17 : Carte de contour avec valeur min% relevée à 0,5 %



Il est possible d'accentuer les pics de faible intensité en diminuant la valeur **max%** de sorte que la palette de couleurs couvre une plage d'intensité plus petite, mais que tous les pics supérieurs à cette valeur aient la même couleur. Vous pouvez également accentuer ces pics en sélectionnant la case **Log scale**. L'activation de l'option **Log scale** nécessite de définir une valeur non nulle pour **min%** (par exemple, 1 ou 0,1), et fait correspondre les couleurs au logarithme de l'intensité en pourcentage.

Les outils de visualisation de plusieurs échantillons du logiciel incluent la capacité d'afficher les TIC, les XIC et les spectres de plusieurs échantillons comme une série de cartes de chaleur individuelles, ce qui peut aider à comparer les échantillons. La [Illustration D-18](#) illustre une série de chromatogrammes TOF provenant de six analytes. Consultez [Utiliser plusieurs échantillons](#).

Illustration D-18 : Chromatogramme de la carte de chaleur

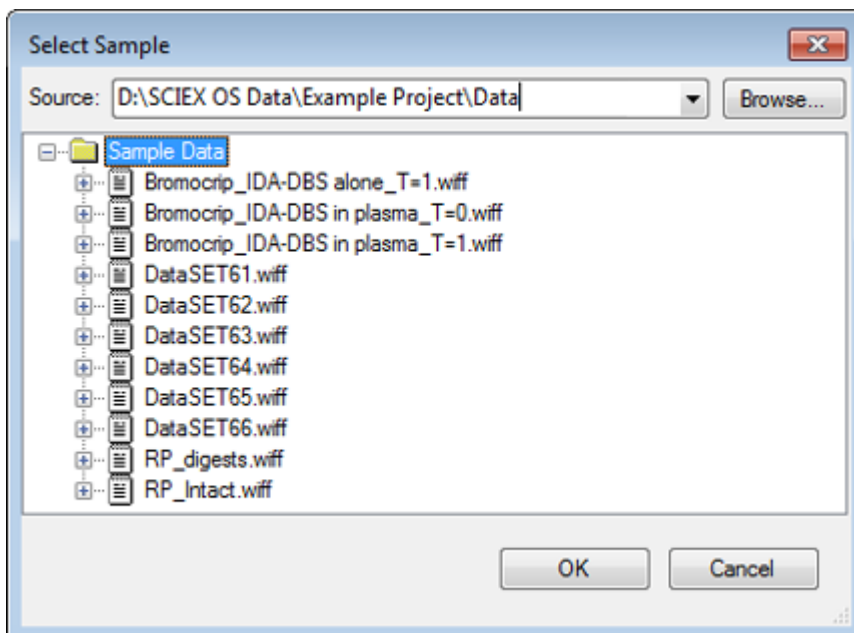


## Utiliser des chromatogrammes et des spectres

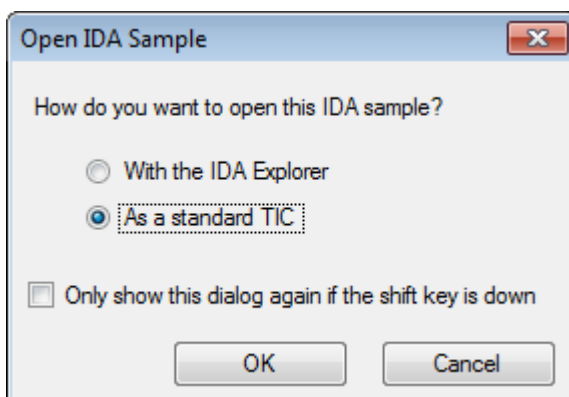
Cette section décrit les options de traitement les plus courantes. Le fichier utilisé est un fichier IDA avec un certain nombre d'expériences en boucle, mais dans cet exemple, c'est la première expérience d'exploration qui est utilisée, en simulant une analyse LC/MS simple. Dans la section suivante, la fonctionnalité IDA est explorée.

### Ouvrir un fichier de données

1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.

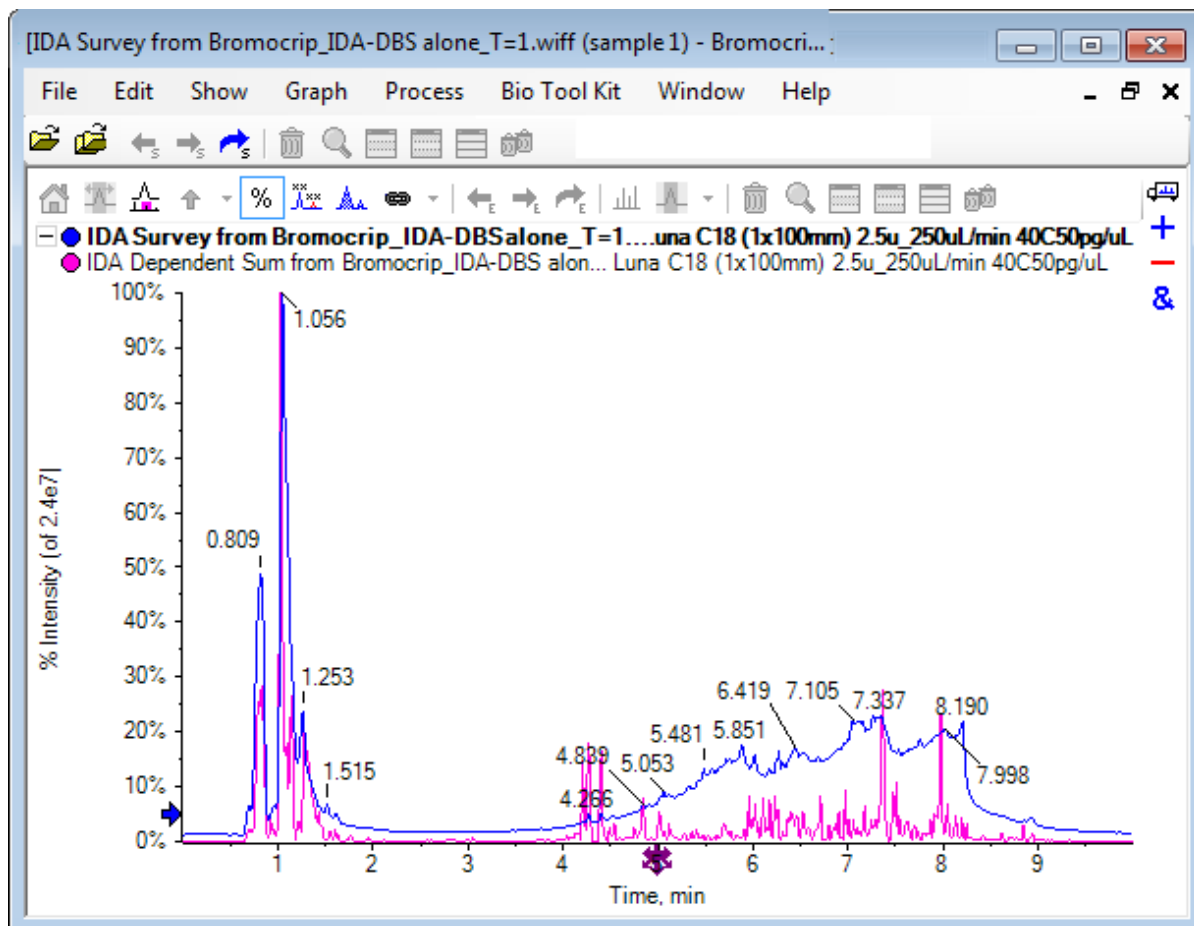
**Illustration D-19 : Boîte de dialogue Select Sample**

2. Si le dossier **Sample Data** n'est pas encore sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**. Pour des informations sur l'emplacement des fichiers de données installés, consultez la section [Société](#).
3. Pour afficher tous les échantillons du fichier, cliquez sur l'icône à gauche du fichier **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff**.  
Le fichier **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff** ne comporte qu'un seul échantillon.
4. Sélectionnez le nom de l'échantillon, puis cliquez sur **OK**.  
Étant donné qu'il s'agit d'un fichier IDA, le logiciel vous invite à indiquer le mode d'ouverture de l'échantillon sélectionné.

**Illustration D-20 : Ouvrir un échantillon IDA**

5. Sélectionnez la case **As a standard TIC** si elle n'est pas encore cochée, puis cliquez sur **OK** pour générer les TIC affichés à la [Illustration D-21](#).

### Illustration D-21 : TIC



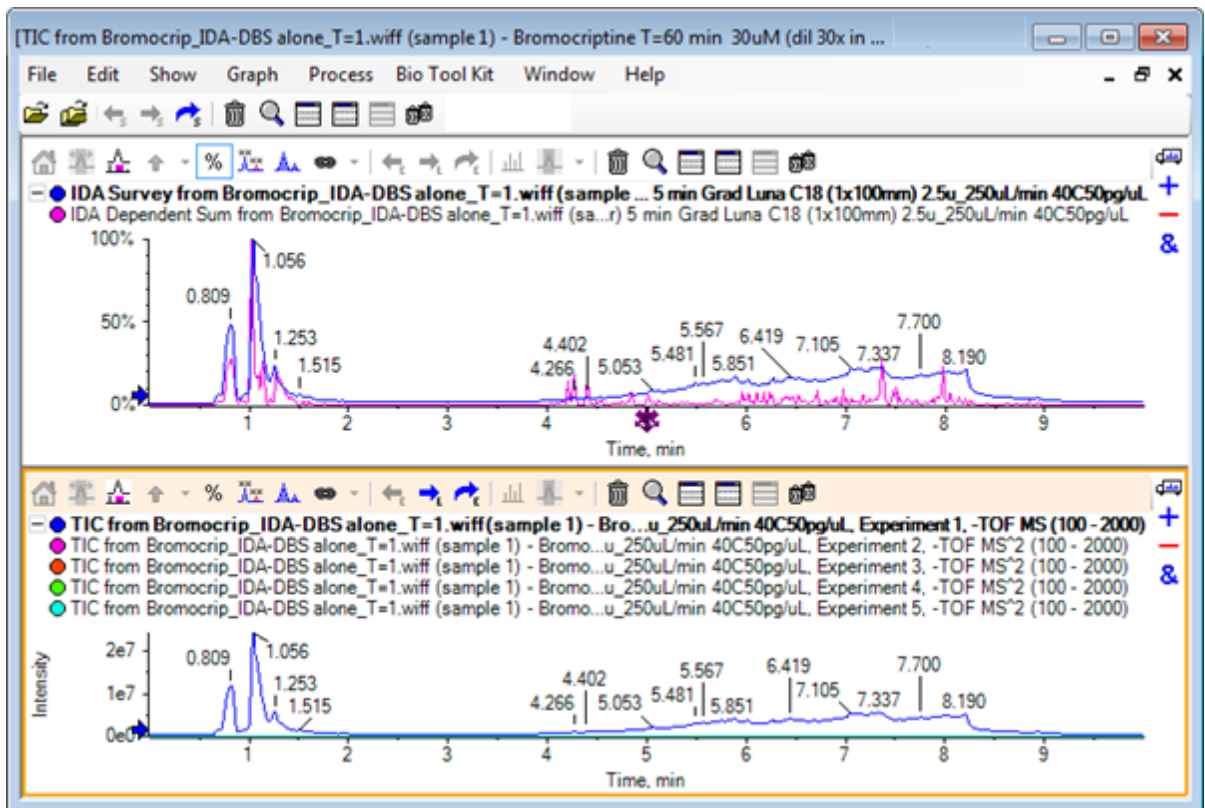
Le volet comporte une superposition pour le TIC de balayage d'exploration (bleu) et une autre pour la somme des balayages dépendants (ion produit). Dans ce cas, nous souhaitons traiter les données d'exploration pour afficher uniquement le TIC d'exploration.

## Afficher le TIC pour une expérience

1. Double-cliquez sur l'icône **Double-cliquer pour superposer des TIC individuels pour toutes les expériences** dans le centre de l'axe des x pour générer des TIC superposés pour toutes les expériences.

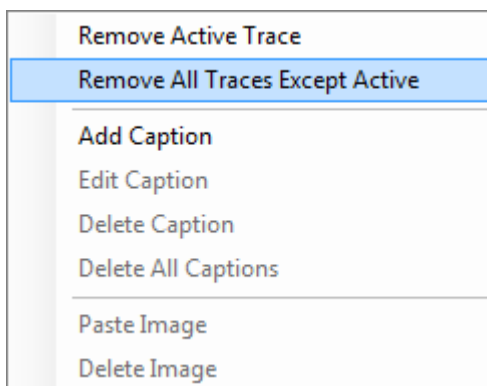
Le nouveau chromatogramme est le volet actif. En outre, étant donné que l'exploration est la première expérience, il s'agit du tracé actif indiqué par le titre en gras dans l'en-tête.

## Illustration D-22 : TIC superposés



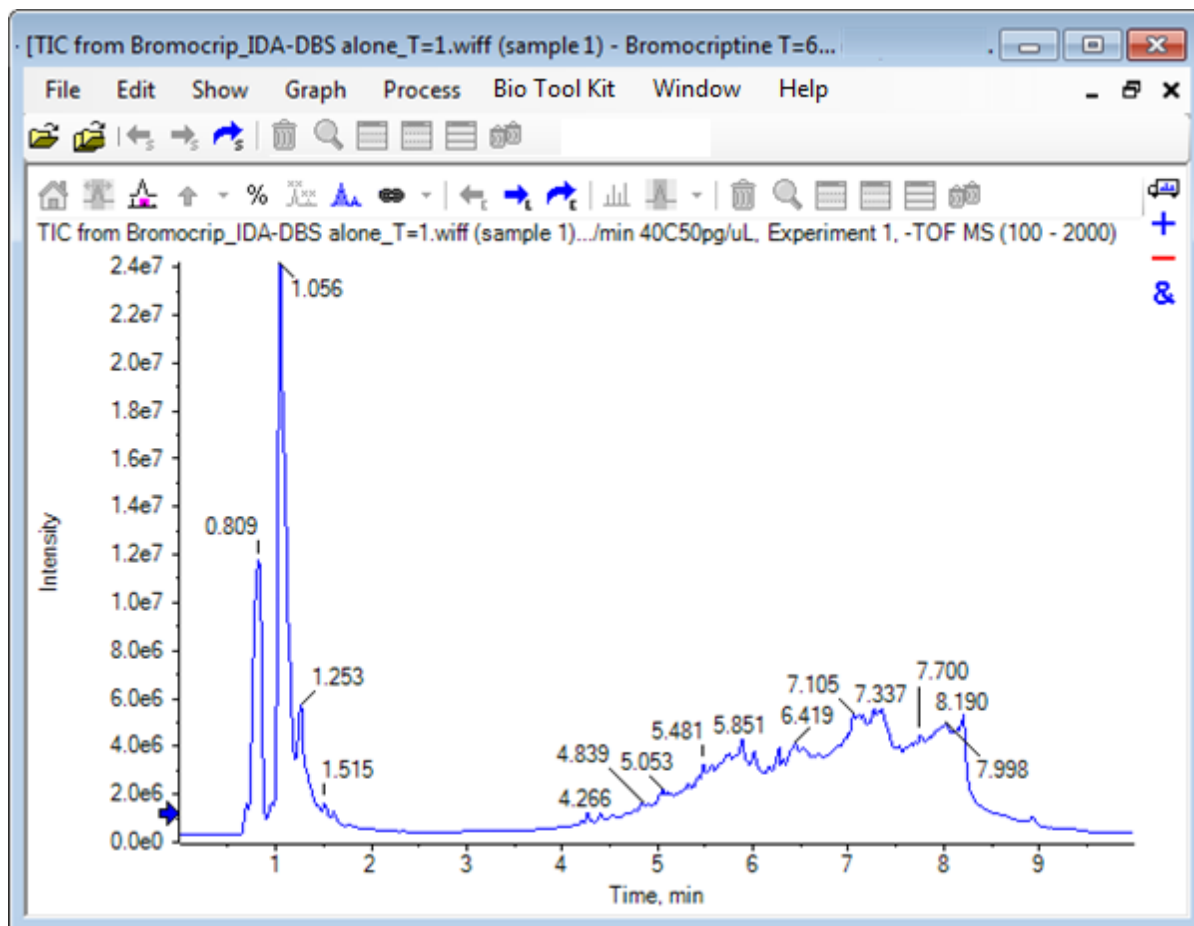
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le volet du chromatogramme actif, puis cliquez sur **Remove All Traces Except Active** de sorte que seul le TIC d'exploration reste.

## Illustration D-23 : Menu contextuel



3. Dans le même volet, cliquez sur l'icône **Supprime les autres volets** pour conserver uniquement le TIC d'exploration.

Illustration D-24 : TIC d'exploration



## Afficher un XIC pour une formule moléculaire connue

Certains pics visiblement petits sont mis en évidence dans la plage de 4 à 7 min, mais il est possible qu'un grand nombre de pics soient masqués par le bruit de fond qui est relativement élevé dans ces données. Étant donné que cet échantillon correspond à une incubation avec des microsomes de la bromocriptine, utilisez le rapport  $m/z$  de l'ion moléculaire attendu comme guide initial pour l'emplacement du pic. La formule moléculaire de la bromocriptine est  $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$  et, comme il s'agit de données en mode négatif, un ion  $(M - H)^-$  est attendu.

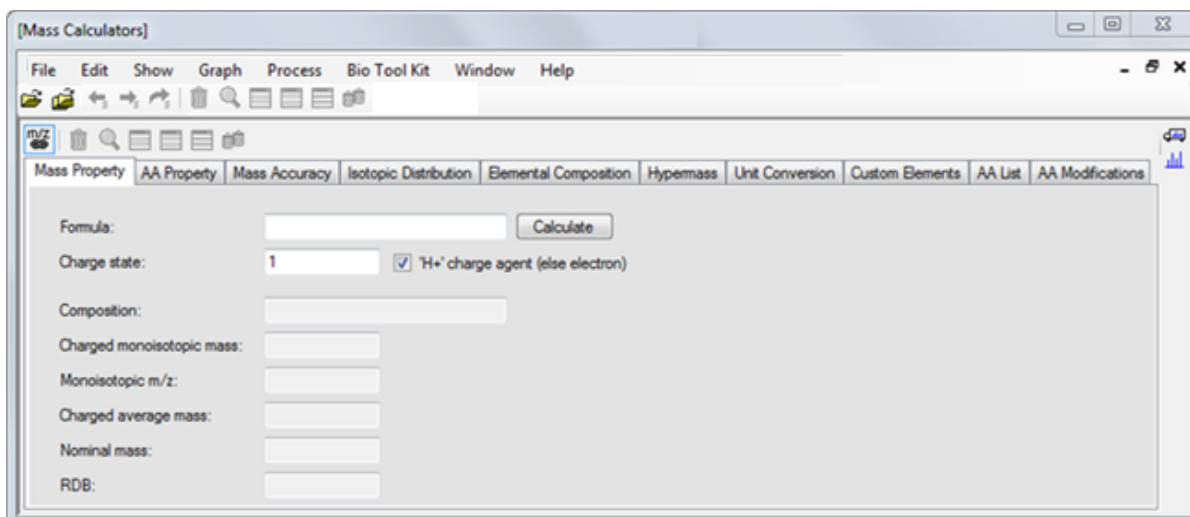
1. Cliquez sur **Show > Mass Calculators**.
2. Cliquez sur l'onglet **Mass Property** dans le volet **Mass Calculators**.
3. Saisissez la formule moléculaire dans le champ **Formula**.
4. Saisissez **-1** dans le champ **Charge state**.
5. Sélectionnez l'option **'H+' charge agent (else electron)**.
6. Cliquez sur **Calculate**.



**Remarque :** Il est également possible de supprimer manuellement un atome d'hydrogène de la formule moléculaire et de ne pas sélectionner la case 'H+' charge agent (else electron).

La boîte de dialogue est actualisée et affiche un certain nombre de valeurs de masse : mono-isotopique, moyenne, etc.

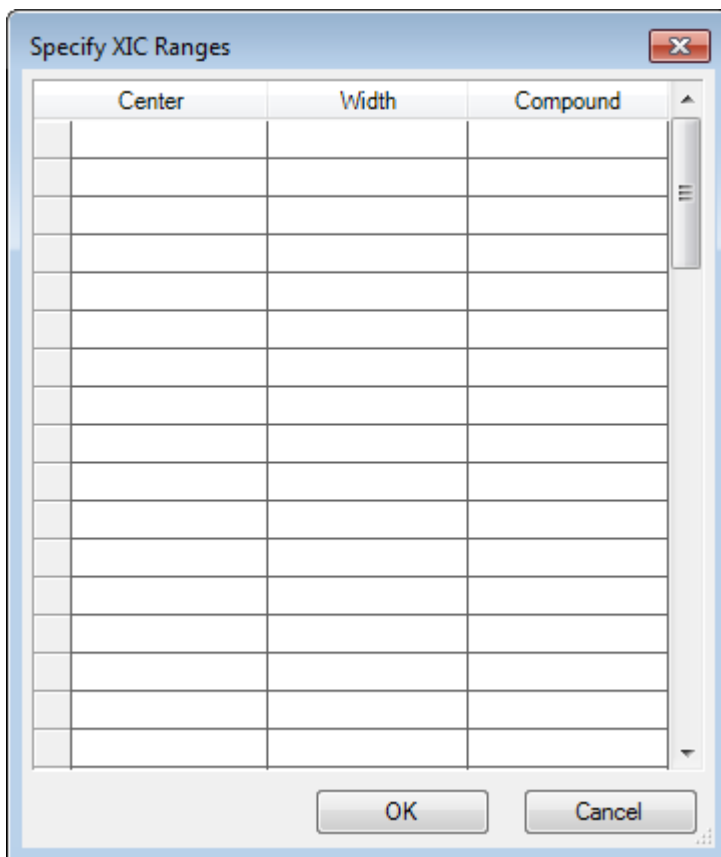
### Illustration D-25 : Volet Mass Calculators



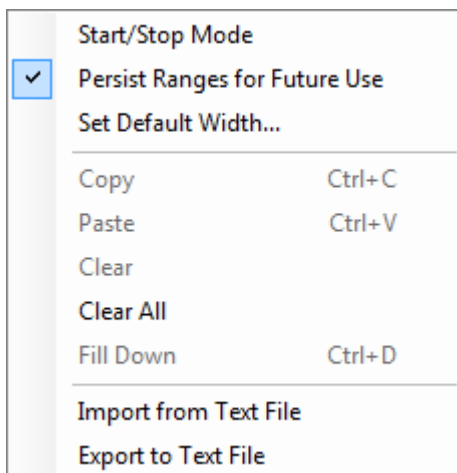
**Remarque :** À ces valeurs de masse, les isotopes sont facilement résolus. Par conséquent, la valeur m/z mono-isotopique est la valeur la plus appropriée.

7. Sélectionnez la valeur **Monoisotopic m/z** et appuyez sur **Ctrl+C** pour copier la valeur dans le presse-papiers.
8. Cliquez sur l'icône **Supprime ce volet** pour supprimer le volet **Mass Calculators** ou sur l'icône **Masque ce volet** pour masquer le volet.
9. Cliquez sur **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)** pour ouvrir la boîte de dialogue **Specify XIC Ranges**.

Illustration D-26 : Boîte de dialogue Specify XIC Ranges



10. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans la boîte de dialogue **Specify XIC Ranges** pour ouvrir le menu contextuel.
11. Dans le menu contextuel, procédez comme suit :
  - a. Assurez-vous que l'option **Start/Stop Mode** est désactivée, de sorte que les valeurs XIC soient saisies en tant que valeur centrale et largeur.
  - b. Cliquez sur **Set Default Width**, saisissez **0,05**, puis cliquez sur **OK**.
  - c. Cliquez sur **Persist Ranges for Future Use** de sorte que les valeurs soient mémorisées lors de la prochaine utilisation de cette boîte de dialogue.

**Illustration D-27 : Menu contextuel**

12. Revenez à la boîte de dialogue **Specify XIC Ranges**.  
La boîte de dialogue est maintenant configurée de sorte qu'une seule masse doit être saisie pour chaque XIC à l'étude. Une largeur par défaut est utilisée.
13. Sélectionnez la première cellule sous **Center**, puis appuyez sur **Ctrl+V** pour coller la valeur de masse de l'étape 7.
14. Cliquez sur **OK**.

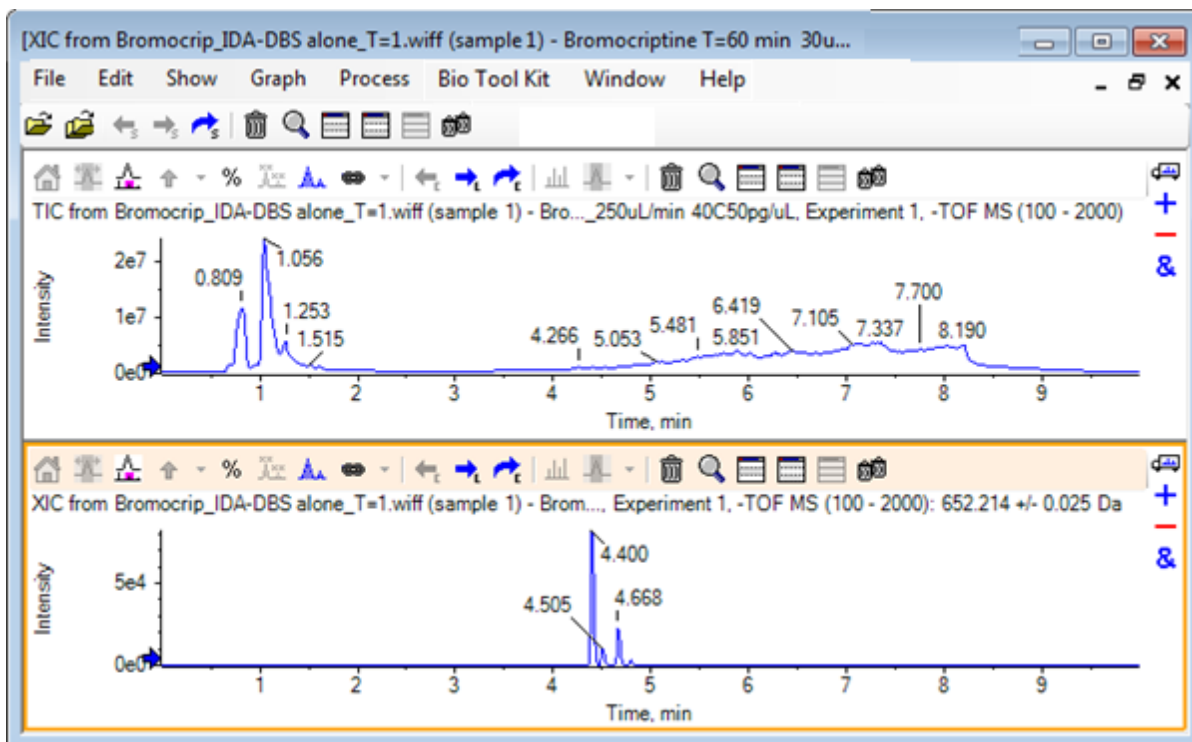
---

**Remarque :** Une largeur par défaut ayant été définie, il n'est pas nécessaire de saisir une valeur individuelle.

---

Le volet contient désormais les TIC et les XIC pour l'ion moléculaire attendu de la bromocriptine, qui indique plusieurs pics.

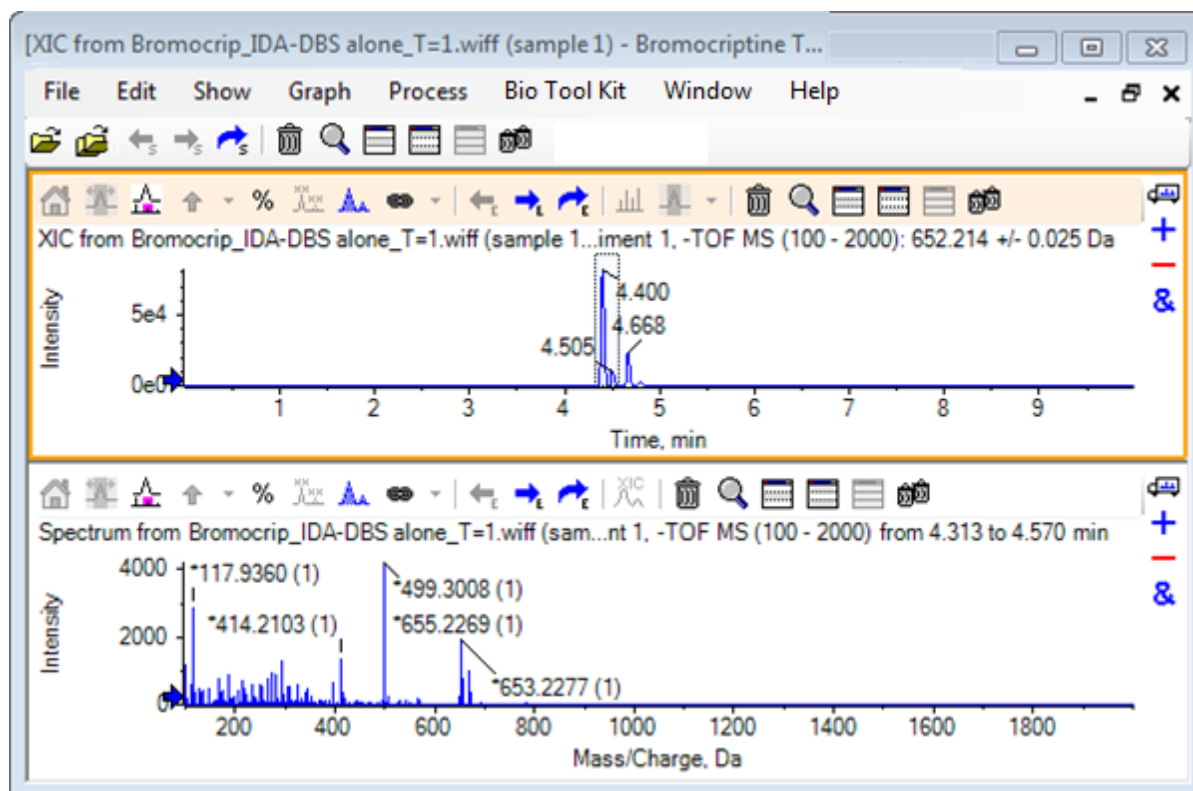
### Illustration D-28 : TIC et XIC pour l'ion moléculaire attendu de la bromocriptine



## Générer et interagir avec un spectre

1. Masquez le volet TIC, effectuez une sélection autour du plus grand pic dans le XIC, puis cliquez sur l'icône **Affiche un spectre pour la sélection** pour générer le spectre moyen pour cette zone.

## Illustration D-29 : Spectre du plus grand pic dans le XIC



**Remarque :** Dans la [Illustration D-29](#), le champ **Label** dans l'onglet **Peak Labeling & Finding** de la boîte de dialogue **Options** (accessible via **Edit > Options**) est défini sur **Mass (Charge)**.

2. Faites glisser l'axe des x de 630 à 700 Da environ pour agrandir le spectre sur cette zone.

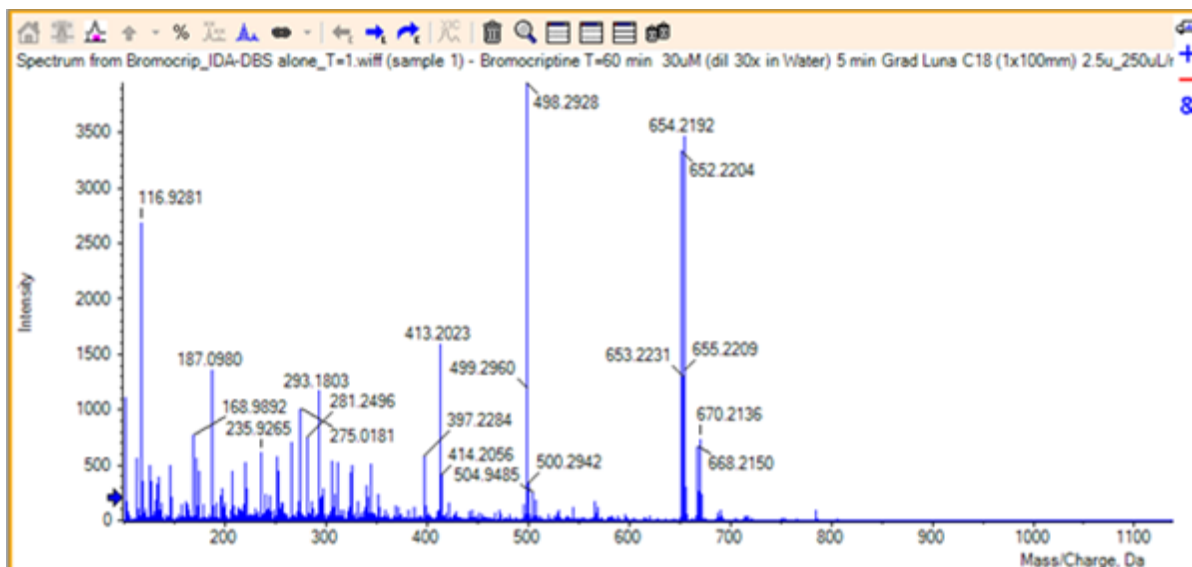
**Remarque :** Cette action peut nécessiter deux étapes.

Il y a un pic à 652,2199, très proche de la valeur attendue de 652,2140, qui affiche également un modèle isotopique du brome, mais il y a un deuxième amas isotopique du brome qui commence à 668,2158. Les valeurs exactes du rapport  $m/z$  diffèrent selon la fenêtre du temps de rétention exact sélectionnée dans le XIC.

**Remarque :** Le type de marquage utilisé ici indique un rapport  $m/z$  et une estimation de l'état de charge entre parenthèses (selon l'espacement entre les pics). Les pics qui paraissent mono-isotopiques sont également marqués d'un astérisque. L'algorithme de marquage ignore les isotopes autres que les isotopes  $^{13}\text{C}$ . Il marque l'isotope  $^{81}\text{Br}$  comme charge unique, mais le marque comme mono-isotopique de façon incorrecte.

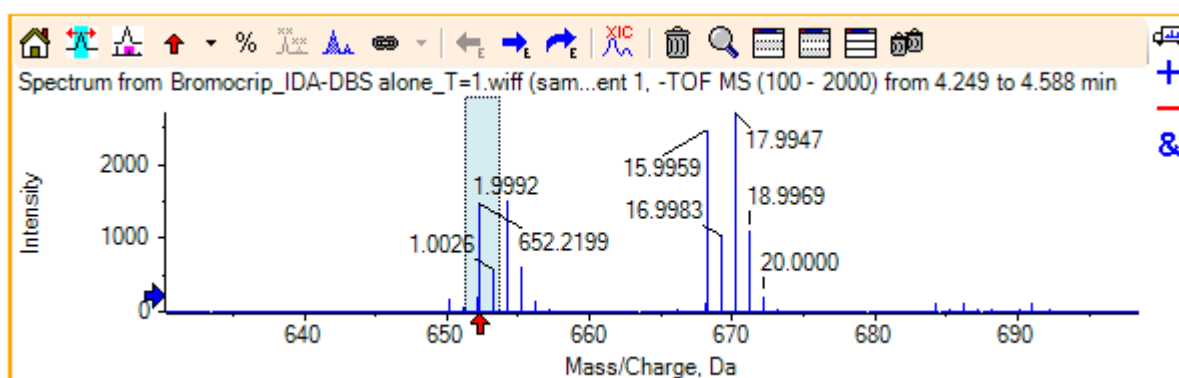
3. Définissez le marquage sur le type par défaut en cliquant sur **Edit > Options**, en accédant à l'onglet **Peak Labeling & Finding** et en définissant le paramètre sur **Mass / Charge** dans le champ **Label**.
4. Cliquez sur **OK**.

### Illustration D-30 : Spectre avec un type de marquage différent



5. Dans le spectre développé, effectuez une sélection autour du pic à 652,2199, puis cliquez sur l'icône **Ajoute des marqueurs fléchés pour les pics sélectionnés**.

### Illustration D-31 : Spectre représentant sur le pic sélectionné



Le marquage de la masse est désormais relatif au pic sélectionné de sorte que les différences entre les pics de masse sont affichées. Le marquage du pic à 668,2158 indique désormais 15,9959, ce qui correspond à la masse de l'oxygène. Il indique que ce pic correspond à un métabolite d'hydroxy-bromocriptine.

**Conseil !** Vous pouvez déplacer les flèches en les faisant glisser vers un autre pic et les supprimer en sélectionnant **Remove All Arrows** dans la liste à côté de l'icône de flèche.

6. Effectuez une sélection autour du pic marqué 15,9959, puis cliquez sur l'icône **Affiche un XIC pour la sélection**.
7. Dans la boîte de dialogue **XIC Selection Ranges**, cliquez sur **OK**.

Illustration D-32 : Boîte de dialogue XIC Selection Ranges

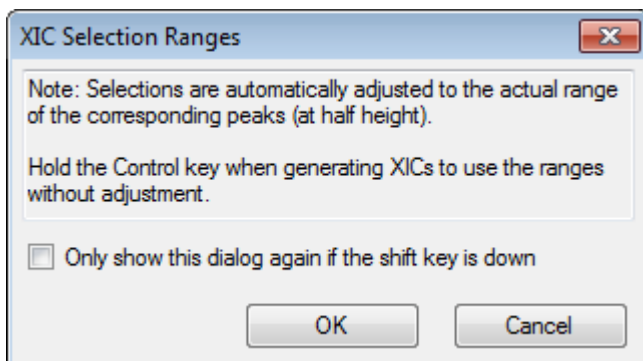
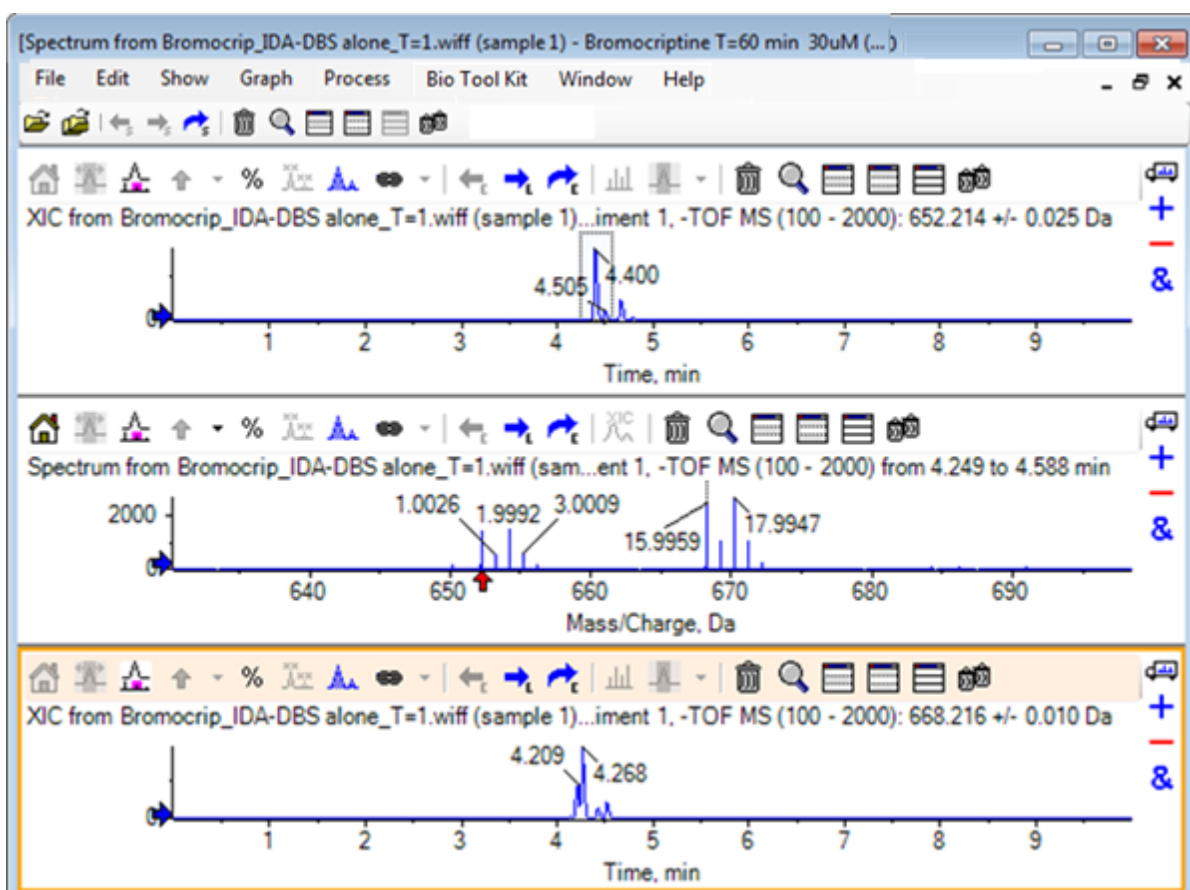


Illustration D-33 : XIC

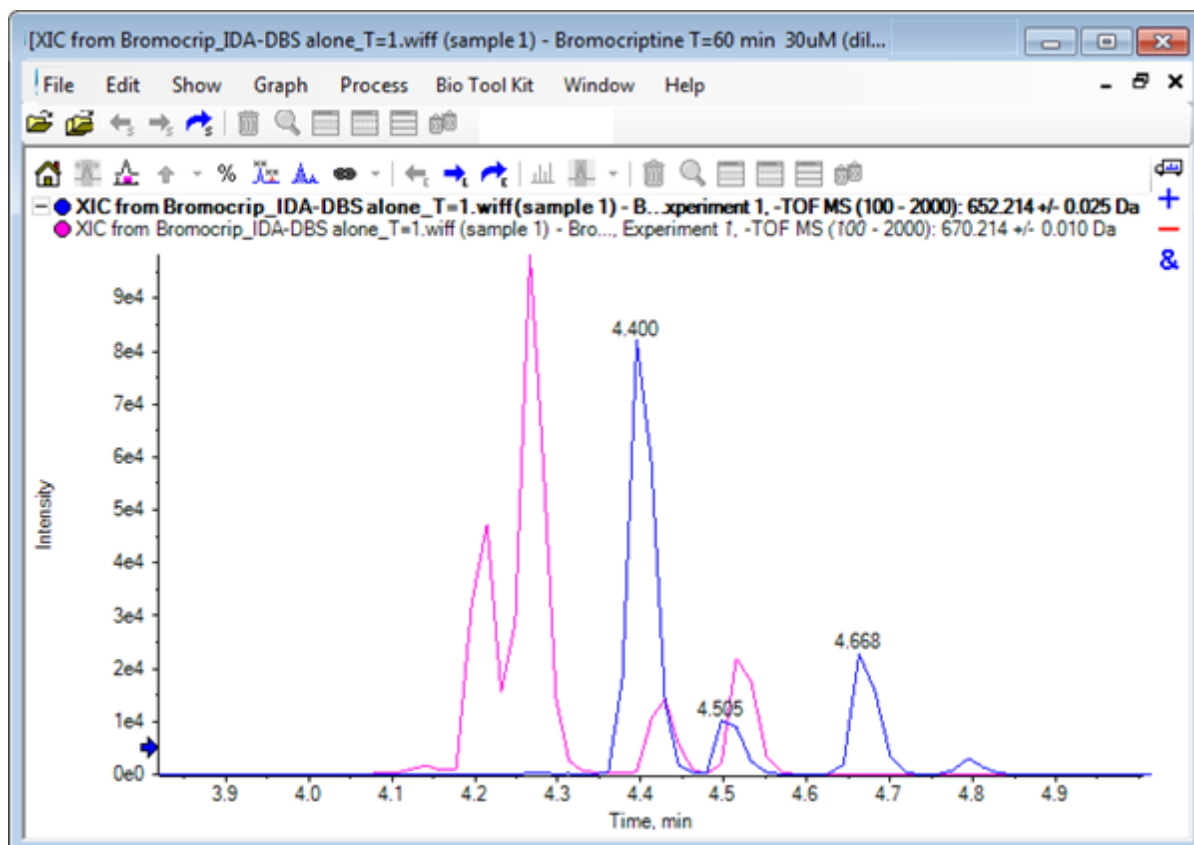


Il s'agit d'une façon pratique de générer des XIC de manière interactive. Par défaut, la largeur utilisée pour le XIC est la largeur du pic de masse à mi-hauteur. Un lien de sélection s'affiche dans le spectre.

8. Faites glisser le lien de sélection pour mettre à jour le XIC affiché et répétez l'étape pour en ajouter d'autres.

9. Cliquez sur l'icône **Faire glisser vers un autre graphique pour superposer les données actives dans le graphique cible** dans ce nouveau chromatogramme, puis faites glisser le chromatogramme vers le volet XIC d'origine pour les superposer.

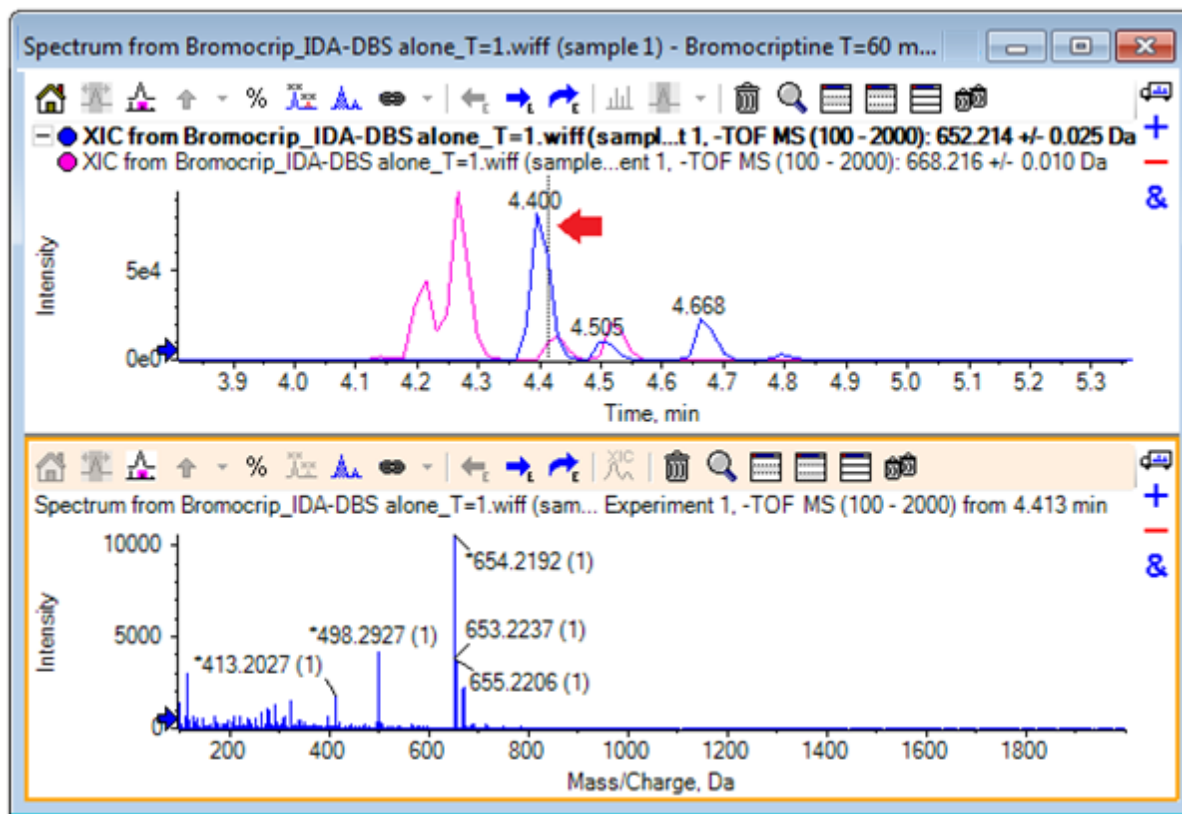
### Illustration D-34 : XIC superposés



10. Masquez ou supprimez le deuxième volet de chromatogramme et le spectre, puis agrandissez les chromatogrammes superposés pour afficher la zone autour de 4 à 5 min.  
Il existe deux pics autour de 4,4 min, un dans chaque XIC, qui éluent de façon rapprochée, mais pas exactement au même temps de rétention. Il existe également plusieurs pics dans le chromatogramme 668,216, ce qui indique vraisemblablement la présence d'autres métabolites hydroxylés.
11. Double-cliquez dans le volet du chromatogramme à 4,40 min afin de générer le spectre d'un balayage unique.



## Illustration D-35 : Spectre d'un balayage unique



Une ligne en pointillés dans le XIC indique le balayage (marqué par une flèche dans la [Illustration D-35](#)). Si la ligne est déplacée, le spectre est alors actualisé de façon à ce que la zone autour de 4,40 min puisse être explorée. Utilisez les touches fléchées avant et arrière pour vous déplacer, un balayage à la fois. Il est possible d'obtenir un spectre propre pour le pic dont le rapport  $m/z$  est de 652,214 en déplaçant la ligne vers une zone où le signal ionique 668,215 est égal à zéro (même si ici également, le bruit de fond est relativement élevé). En revanche, il n'est pas possible d'obtenir un spectre propre pour ce dernier de cette façon.

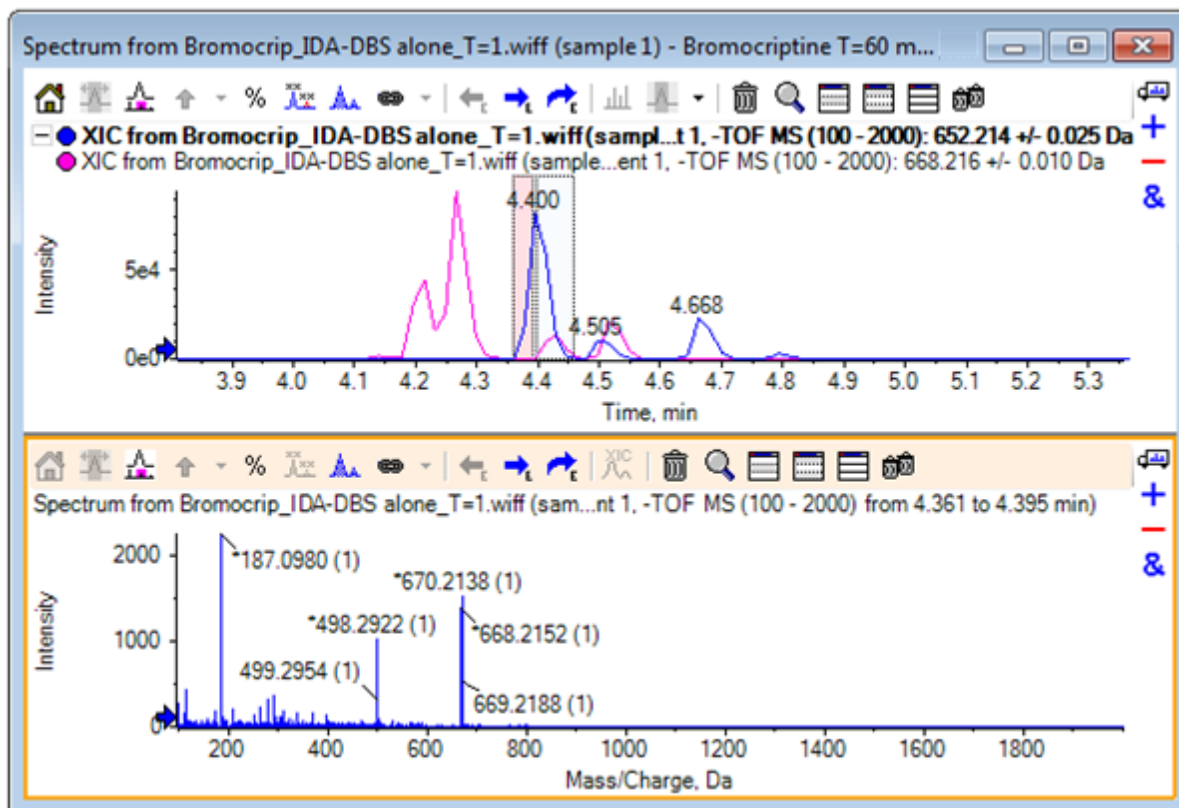
12. Supprimez le volet du spectre.
13. Dans le volet du chromatogramme, effectuez une sélection limitée qui comprend le côté gauche du pic 652 mais qui évite le pic 668, puis cliquez sur l'icône **Définir la plage de soustraction du bruit de fond**.

La sélection s'affiche en rose.

Lorsqu'une plage de soustraction a été définie, elle est automatiquement soustraite des spectres générés ultérieurement. Vous pouvez supprimer la plage en sélectionnant **Clear Subtraction Range** dans la liste accessible via la petite flèche à droite de l'icône **Définir la plage de soustraction**.

14. Effectuez une autre sélection dans le chromatogramme qui comprend le point culminant du pic 668, mais aussi peu que possible du pic 652, puis cliquez sur l'icône **Affiche un spectre pour la sélection**.

Illustration D-36 : Spectre après soustraction du bruit de fond pour le pic 668



Il en résulte un spectre soustrait du bruit de fond pour le pic 668, avec une toute petite partie du pic 652. Les deux sélections effectuées dans le chromatogramme restent liées à leurs spectres respectifs, même si le bruit de fond n'est pas visible, et vous pouvez les déplacer vers d'autres parties du chromatogramme. Le fait de déplacer la sélection du spectre met automatiquement à jour le spectre affiché, mais si vous modifiez la zone du bruit de fond, cette mise à jour s'applique uniquement aux spectres générés postérieurement.

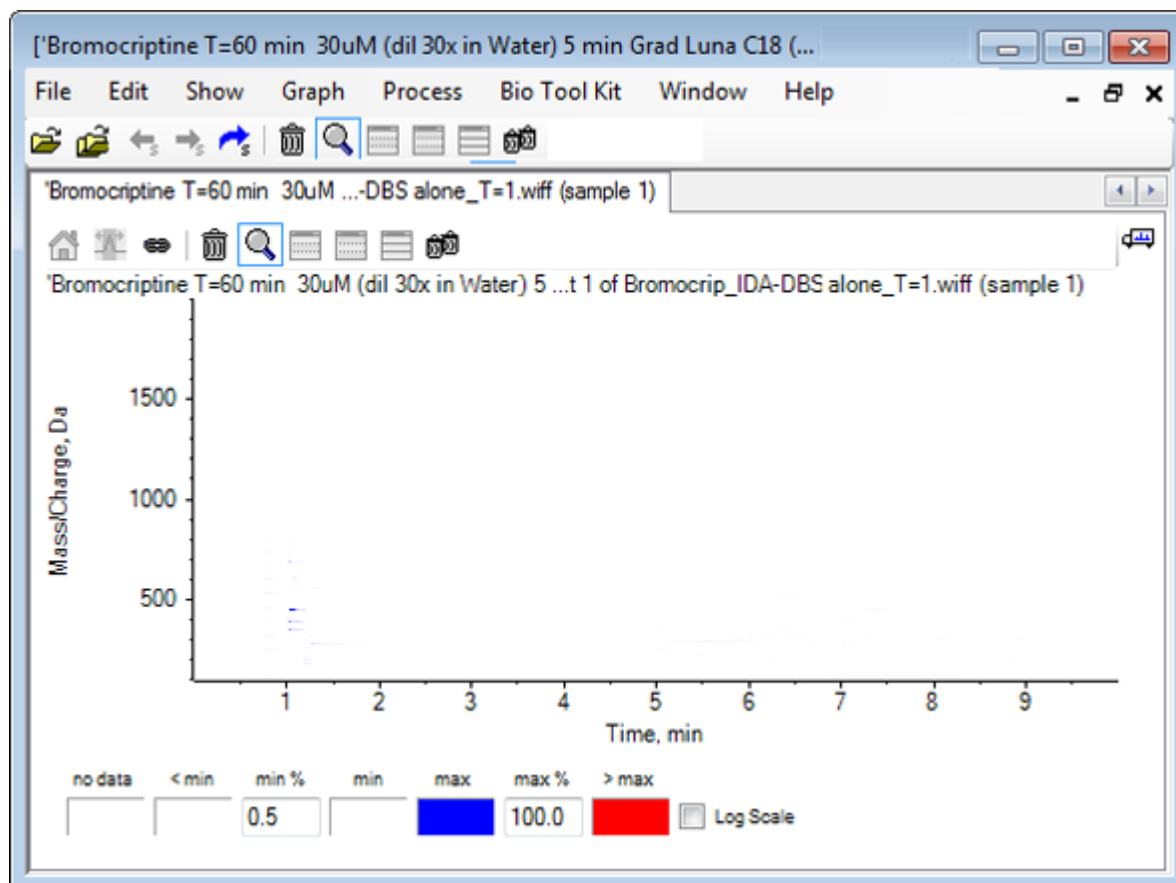
15. Cliquez sur l'icône **Masque tous les autres volets**, cliquez dans le TIC du spectre unique, puis sur l'icône **Supprime tous les autres volets** pour afficher uniquement le TIC.
16. Si le volet du TIC a été supprimé, cliquez sur **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**. Sélectionnez ensuite **Period 1, Experiment 1**, puis cliquez sur **OK**.

## Utiliser un graphique de contour

Une alternative à la visualisation des parties d'un ensemble de données (chromatogrammes ou spectres) consiste à utiliser un graphique de contour pour afficher l'aperçu complet d'une expérience. Les graphiques de contour peuvent s'avérer très utiles, mais il est généralement nécessaire de régler les paramètres d'affichage pour obtenir des résultats optimaux. Dans cet exemple, le composé précurseur est le brome et le graphique de contour permet de localiser des pics avec le modèle isotopique du brome.

1. Avec le TIC de l'expérience unique actif, cliquez sur **Show > LC/MS Contour Pane**, puis cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre** dans la barre d'outils du graphique de contour généré pour afficher uniquement ce volet.
2. Si les contrôles d'aspect (cases de couleur dans le coin inférieur gauche) ne sont pas visibles, cliquez avec le bouton droit de la souris sur **Show Appearance Control**. Consultez la section [Graphiques de contour et cartes de chaleur](#) et le *Guide de référence*.

**Illustration D-37 : Graphique de contour**

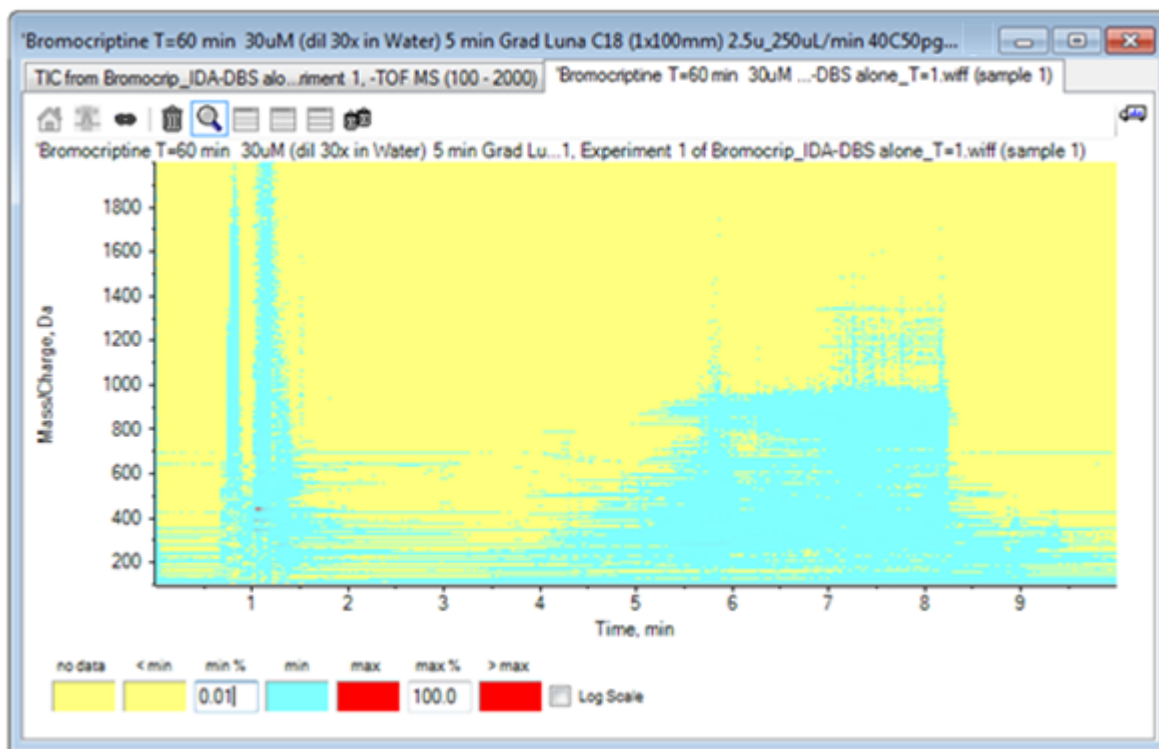


**Conseil !** Avec les paramètres par défaut, la vue n'est pas très utile, car elle est dominée par les pics de faible niveau et le bruit qui masquent les véritables pics. Générez une meilleure vue en exécutant les actions suivantes :

- Modification de l'intensité minimale à afficher. Cela revient à tracer tous les points de données en dessous de ce niveau de la même couleur que les points sans données, de manière à ce qu'ils deviennent invisibles.
- Modification de la configuration des couleurs de sorte que les couleurs disponibles couvrent une plage d'intensité restreinte, améliorant ainsi la visibilité des petits pics.

3. Définissez la valeur **min%** sur **0,01**. Cette action fait disparaître tous les points de données dont les intensités sont inférieures à 0,01 % du pic de base.

### Illustration D-38 : Graphique de contour



Une plus grande partie de la structure dans les données est illustrée. Le volume mort et la zone de lavage de la colonne sont désélectionnés. De plus, un certain nombre de pics de bruit de fond sont présents à tous les temps de rétention et s'affichent sous la forme de lignes horizontales.

4. Sélectionnez la case **Log scale**.

Les couleurs sélectionnées sont mises en correspondance avec le logarithme de l'intensité (en pourcentage de l'intensité du pic de base), ce qui a pour effet d'augmenter les pics de faible intensité. Par exemple, l'amas autour de 4 à 4,5 min passe avec des masses dans une plage comprise entre 600 et 700.

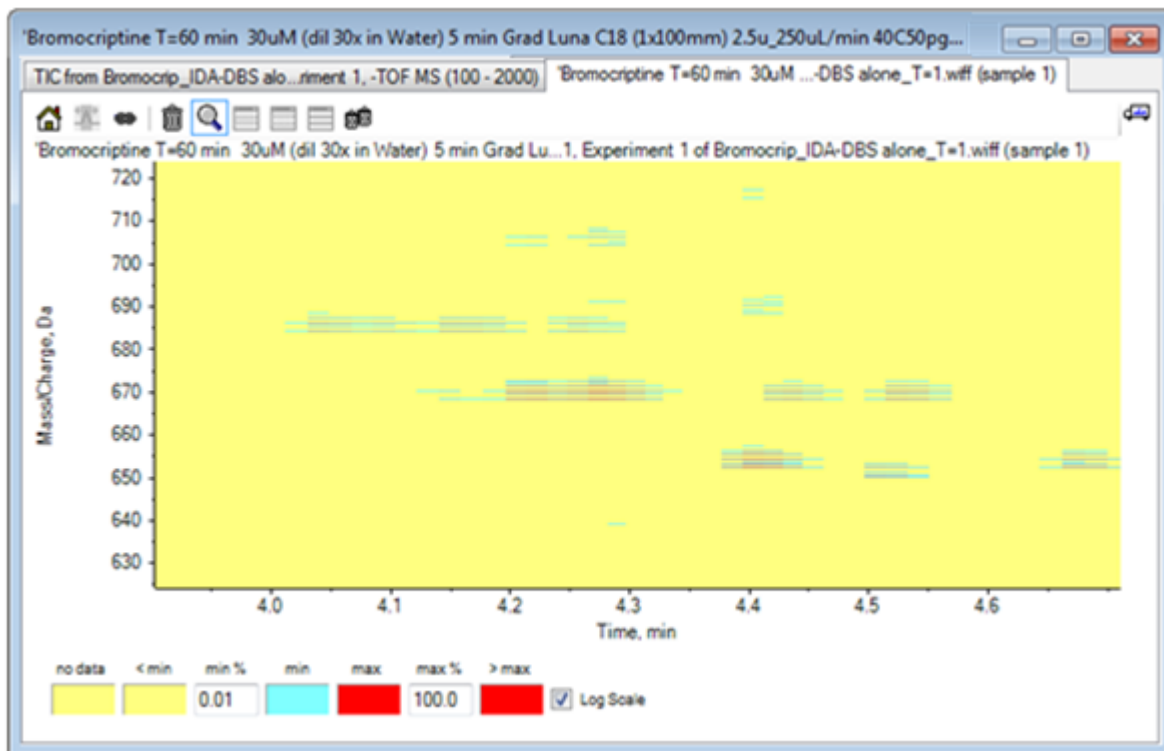
5. Sélectionnez cette zone, puis cliquez sur l'icône **Agrandit la sélection pour un affichage intégral**.

---

**Conseil !** Il est également possible d'agrandir indépendamment l'axe des x et l'axe des y de la manière habituelle.

---

## Illustration D-39 : Graphique de contour



La vue indique désormais qu'il est possible de différencier un certain nombre de pics bromés dans cette zone par des ensembles de quatre lignes parallèles qui correspondent aux isotopes  $^{79}\text{Br}$  et  $^{81}\text{Br}$  et à leurs isotopes  $^{13}\text{C}$ .

6. Familiarisez-vous avec les paramètres de contrôle de la couleur et examinez les effets sur la vue.
7. Une fois terminé, fermez la fenêtre.  
Cette action entraîne également la fermeture du fichier de données.

## Résumé

Dans cette section, les tâches suivantes sont abordées :

- Accès à un fichier de données et ouverture de ce fichier pour afficher un TIC.
- Modification de l'affichage de sorte qu'une seule expérience est utilisée.
- Utilisation du calculateur de la masse pour déterminer la masse d'un ion d'une composition élémentaire et utilisation de la masse pour générer un XIC.
- Génération interactive de spectres et de chromatogrammes et utilisation des marqueurs fléchés sur les spectres pour afficher la différence de masse entre les pics.
- Génération de spectres après soustraction du bruit de fond.
- Utilisation d'un graphique de contour pour générer l'aperçu d'un ensemble de données.

Ces opérations sont la base de tous les traitements de données interactifs, quel que soit le type de données affichées.

## Utiliser IDA Explorer

Dans une expérience IDA, les données de spectre MS/MS (et éventuellement MS3) sont collectées automatiquement lorsque les données contenues dans un ou plusieurs spectres d'exploration répondent à certains critères. Il est fréquent de définir les paramètres pour éviter de recueillir plusieurs spectres à partir du même pic LC en excluant la masse du précurseur (en ne lui permettant pas d'agir comme un déclencheur) pendant une certaine durée. Parfois, il est possible de collecter des spectres redondants. En outre, étant donné qu'IDA se déclenche dès qu'un pic répond aux critères, il génère habituellement un spectre au début du pic LC qui risque de ne pas être de qualité optimale.

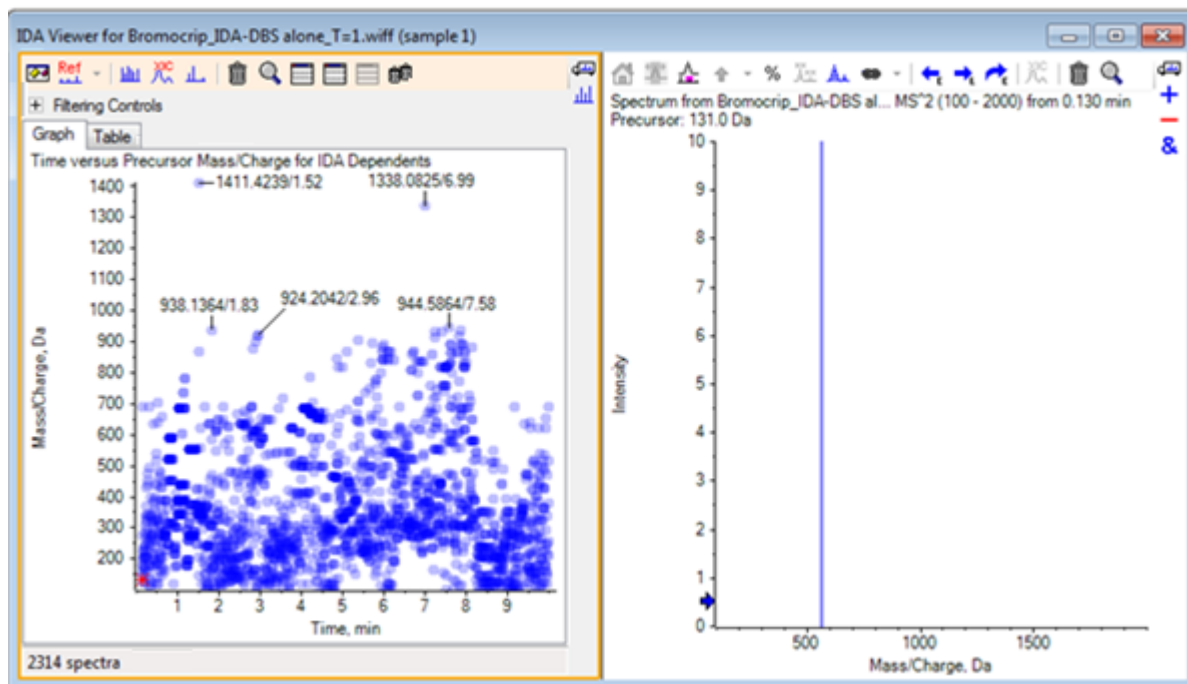
Le logiciel contient des outils qui permettent d'afficher, de filtrer et de traiter les données IDA. Certains outils sont abordés dans cette section.

Fermez toutes les fenêtres avant de commencer.

### Afficher et fusionner les spectres

1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.
2. Si le dossier **Sample Data** n'est pas encore sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**.
3. Sélectionnez le fichier **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff**, puis cliquez sur **OK**.
4. Dans la boîte de dialogue **Open IDA Sample**, cliquez sur **With the IDA Explorer**, puis sur **OK**.  
Le programme examine tous les spectres dans le fichier de données, puis génère le graphique suivant.

## Illustration D-40 : IDA Viewer



Le volet de gauche contient un onglet **Graph** et un onglet **Table**. L'onglet **Graph** affiche un graphique de contour virtuel où chaque point de données représente le temps de rétention et le rapport  $m/z$  d'un ion qui a été sélectionné comme ion précurseur. L'onglet **Table** affiche une vue tabulaire des points de données sur le graphique de contour virtuel. Le volet de droite affiche le spectre pour les points de données sélectionnés. Dans un premier temps, c'est le premier spectre MS/MS qui s'affiche.

Le graphique de contour utilise l'intensité de la couleur pour refléter l'intensité du pic. Les pics les plus intenses sont représentés par des couleurs foncées. Le système trace les marqueurs, dans la mesure du possible, en veillant à ce qu'ils ne se chevauchent pas avec les points de données ou entre eux. Agrandissez le graphique de contour pour examiner une zone de façon plus détaillée et afficher davantage de marqueurs.

5. Dans le volet de gauche, agrandissez la zone pour passer de 4 à 5 min et de 640 à 700 Da où des pics associés à la bromocriptine ont été localisés.

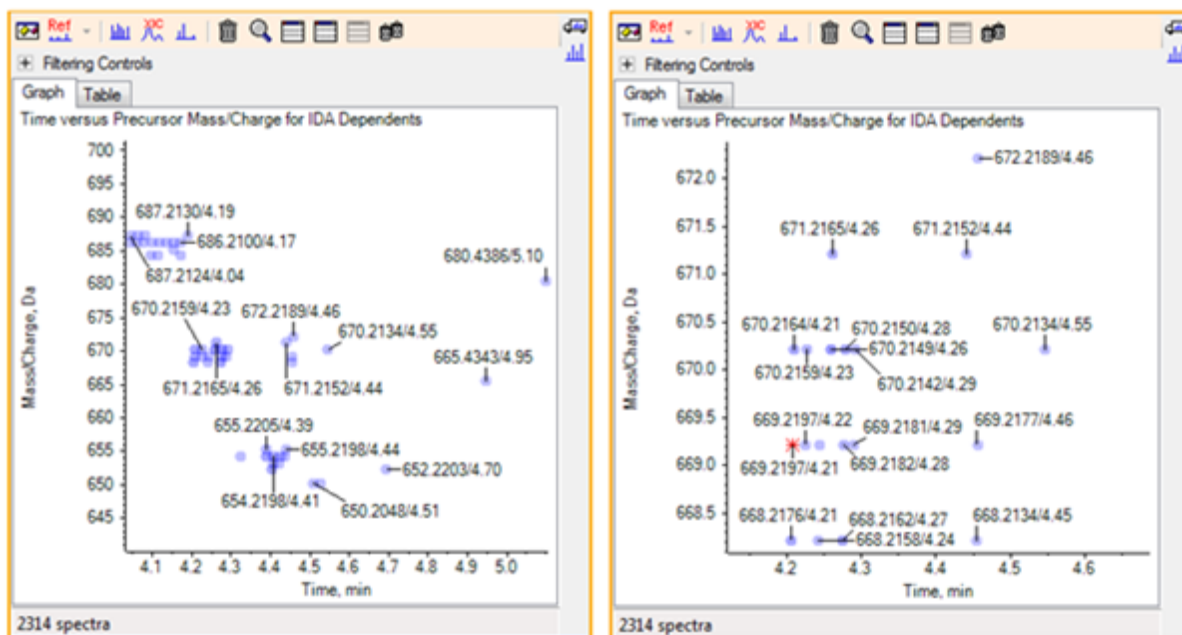
La figure sur la gauche ([Illustration D-41](#)) représente uniquement le volet de gauche. Si la vue en cours est différente, cliquez sur l'icône **Options d'affichage** et désélectionnez la case **Merge spectra with similar precursor masses** dans l'onglet **General** de la boîte de dialogue **Options**.

Un grand nombre de spectres MS/MS ont été recueillis dans cette zone et, même si les pics chromatographiques sont très étroits, plusieurs d'entre eux sont probablement issus des mêmes pics. En outre, des spectres MS/MS ont été recueillis pour chaque pic dans l'amas isotopique.

6. Agrandissez davantage le graphique pour vous concentrer sur l'amas de pics à un rapport  $m/z$  de 668 Da à 672 Da. Consultez le volet de droite à la [Illustration D-41](#).



### Illustration D-41 : IDA Viewer

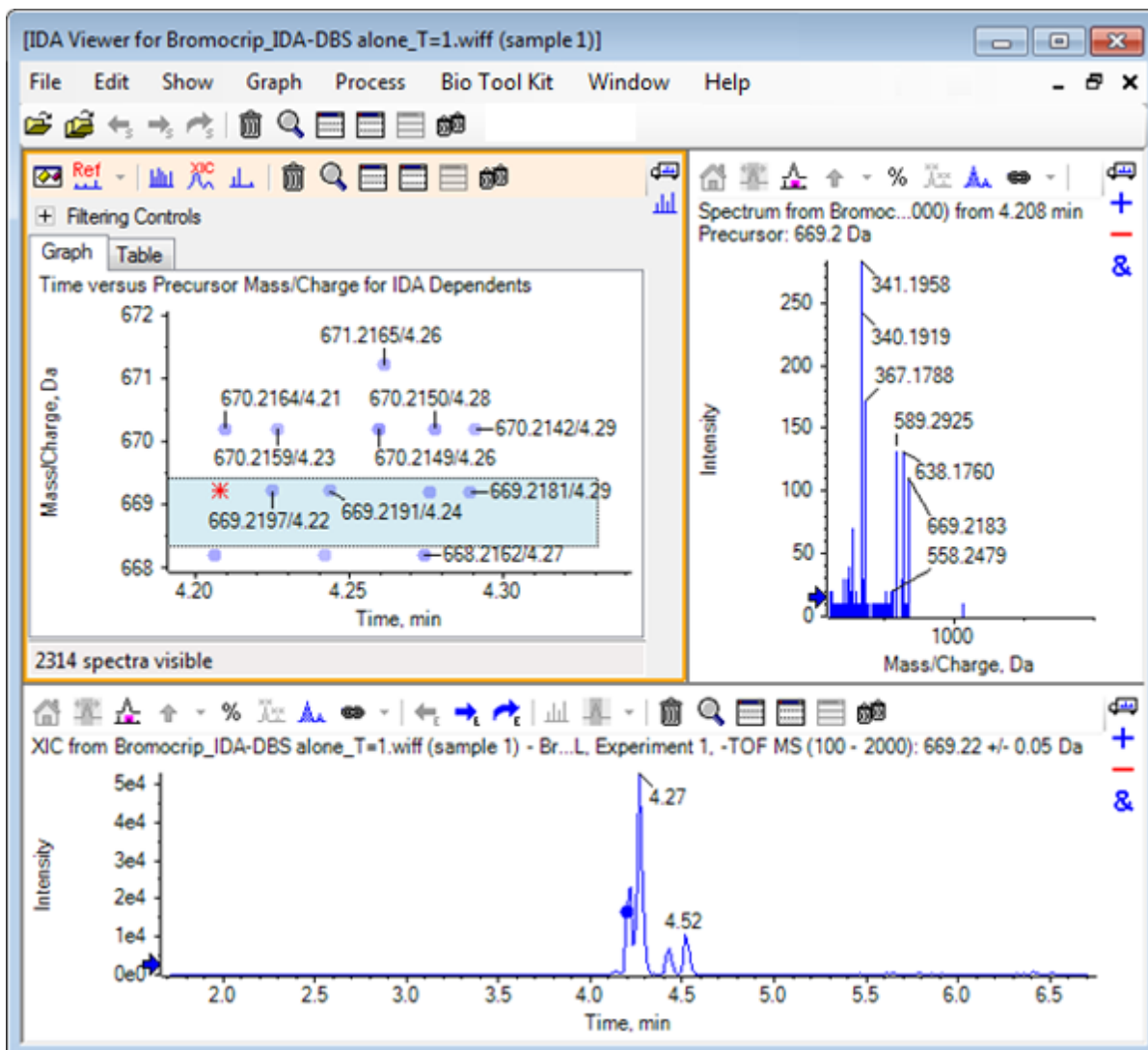


7. Sélectionnez le premier des pics 669,2197 (marqué par un astérisque dans le volet de droite ci-dessus), puis cliquez sur l'icône **Affiche un XIC pour la sélection** pour afficher le XIC pour cette masse du précurseur dans le balayage d'exploration.

La sélection initiale du pic entraîne l'affichage du spectre MS/MS correspondant.



## Illustration D-42 : XIC pour la masse du précurseur dans le balayage d'exploration



Si un point de données dans le graphique de contour n'est pas marqué, déplacez le curseur dessus pour afficher le rapport  $m/z$  et le marqueur du temps de rétention pour que les temps des balayages d'ions produits correspondent au chromatogramme d'exploration.

Pour le pic 669,2, les trois premiers balayages sont liés au premier pic XIC à 4,21 min, qui correspond également à l'emplacement où le balayage 668,2 a été réalisé. Les deux balayages suivants sont liés au pic à 4,27 min, et le dernier balayage est lié au pic à 4,42 min (669,2177/4,46). Aucun balayage n'a été réalisé pour le pic à 669,2 à 4,52 min, mais un balayage a été réalisé pour le pic 670,2.

**Remarque :** Les durées de balayage sont légèrement différentes, car elles sont obtenues de manière séquentielle, même si elles sont détectées dans le même balayage d'exploration. Les petits pics isotopiques risquent de ne pas être détectés aussi rapidement que les grands.

## Tutoriel pour Explorer

---

- Tracez un rectangle de sélection autour des cinq premiers balayages 669,2, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Select Points in Graph Selection**.

Ainsi, le volet du spectre superpose tous les spectres MS/MS.

Le système a acquis plus de balayages que nécessaire. En réduisant le nombre de spectres à traiter et en fusionnant ceux qui sont trop proches pour être des composés différents, nous pouvons obtenir de meilleurs résultats. La fusion utilise à la fois la masse et le temps de rétention pour déterminer ces balayages.

- Cliquez sur l'icône **Options d'affichage**, sélectionnez la case **Merge spectra with similar precursor masses**, puis définissez la valeur pour **Mass tolerance** sur **10** ppm et la valeur pour **RT gap tolerance** sur **0,03** min. (La largeur des pics de cette analyse est d'environ 2 secondes.)
- Cliquez sur **OK**.

---

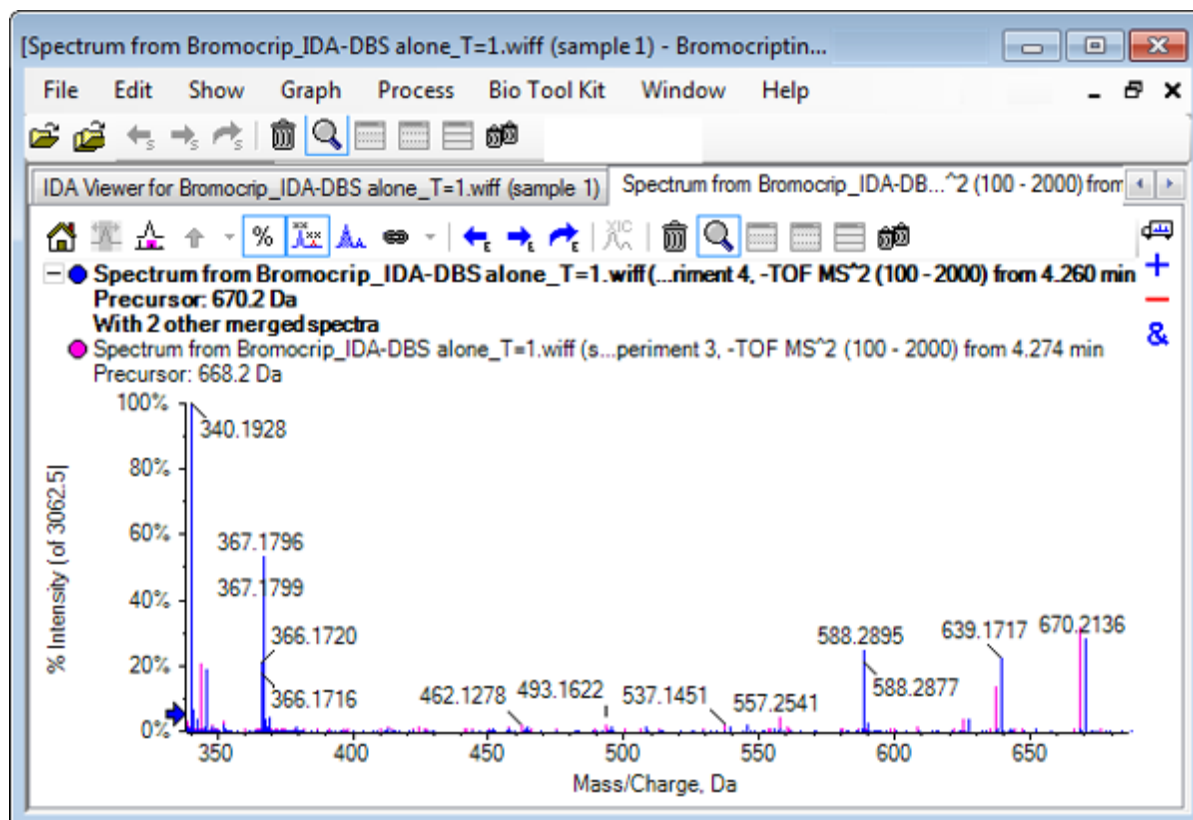
**Remarque** : Cette section de la boîte de dialogue vous permet également de définir la manière dont les XIC doivent être extraits. La largeur de la masse doit correspondre à la largeur de la résolution ou du pic de l'instrument. Il est utile de limiter la plage temporelle utilisée, car cela accélère le traitement.

---

Fusionner les données de cette façon permet de générer trois pics pour 669,2 à 4,21, 4,28 et 4,46 min. La barre d'état en bas du volet IDA Viewer indique l'évolution de la fusion des données, puis affiche le nombre total de spectres dépendants une fois la fusion terminée.

- Cliquez sur le point de données à 670,2149 / 4,26. Appuyez ensuite sur la touche **Ctrl** et cliquez sur le point à 668,2162 / 4,27.
- Dans le volet du spectre MS/MS, cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre**, l'icône **Utiliser l'axe des y (%)** et l'icône **Marquer tous les tracés superposés**, puis agrandissez l'axe des x pour afficher la zone comprise entre 340 et 680.

Illustration D-43 : Spectre : agrandissement de la zone comprise entre 340 et 680 m/z



Étant donné que ces deux précurseurs correspondent aux isotopes Br, les spectres doivent être identiques, à l'exception des ions qui conservent l'atome Br. Ils sont représentés comme une paire de pics séparés par deux Da. Dans cet exemple, les fragments (tracé 668,2) à 344,0441, 625,1765 et 637,1712 ont conservé l'atome Br. Ce n'est pas le cas des fragments à 340,1925, 367,1796 et 588,2877.

Placez une flèche au pic 588,2877. Vous noterez alors que les pics 668 et 670 sont désormais marqués avec la masse des isotopes Br et 1, indiquant que le pic 588,2877 correspond à la perte de HBr.

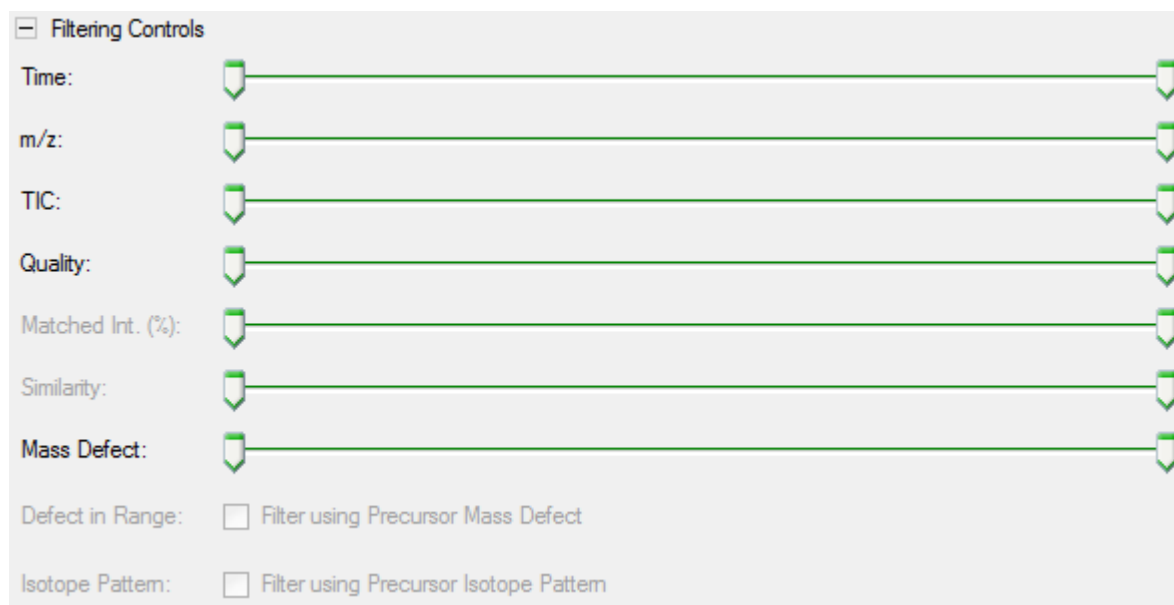
- Retirez la flèche du spectre, cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre**, puis réduisez le graphique de contour pour visualiser tous les points de données.

## Filtrer les données IDA

IDA Explorer contient un certain nombre de filtres qui peuvent être utilisés pour réduire la quantité de données à visualiser ou à traiter. Ceux-ci sont décrits dans cette section.

- Dans le graphique de contour, cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre**, puis cliquez sur l'icône à côté de **Filtering Controls** juste en dessous de la barre d'outils.

### Illustration D-44 : Filtrage des données IDA



Cette fenêtre comporte plusieurs curseurs et cases à cocher, chacun correspondant à un critère de filtrage différent qui peut être utilisé pour ajuster la quantité de données affichées. Le temps de rétention (**Time**) et le rapport  $m/z$  (**m/z**) peuvent être sélectionnés ici ou en agrandissant la vue.

Les autres filtres sont les suivants :

- **TIC** : définit les limites de la somme des intensités des pics dans le spectre MS/MS. Ce filtre est habituellement utilisé pour supprimer les petits balayages bruyants.
- **Quality** : fraction de la somme des intensités supérieure à l'équivalent de 1 comptage, à savoir qui est moins susceptible d'être due au bruit et qui est une estimation de la qualité des spectres.
- **Matched Int. (%)** : permet d'évaluer la fraction de la somme des intensités expliquée par des fragments connus et des pertes neutres lors de l'utilisation de l'option **Fragment Matching**.
- **Similarity** : disponible lorsqu'un spectre de référence a été défini. Cette fonction permet de mesurer la fraction de la somme des intensités correspondant à des fragments communs et à des pertes neutres dans le spectre de référence. Reportez-vous à [Utiliser un spectre de référence](#).
- **Mass Defect** : définit une plage unique pour la partie décimale d'une masse. Cette fonction est utile pour trouver des métabolites, car les transformations métaboliques communes (O, O<sub>2</sub>, etc.) ne changent pas de manière significative la valeur par défaut de la molécule précurseur. L'utilisation d'une plage proche de sa valeur par défaut peut permettre de détecter des métabolites.
- **Defect in Range** : outre l'unique gamme de défauts de masse, le logiciel permet également aux utilisateurs de définir plusieurs défauts applicables à différentes gammes de masses. Si ces plages sont définies, cette case à cocher permet aux

utilisateurs de déterminer si le filtre doit être appliqué ou non. Les plages sont définies dans l'onglet **Mass Defect** de la boîte de dialogue **Options**.

- **Isotope pattern** : cette case à cocher permet d'appliquer un ou plusieurs filtres de modèle isotopique aux données d'exploration MS. En d'autres termes, un point de données est indiqué uniquement si l'ion précurseur sélectionné comporte le modèle souhaité. Ces modèles sont définis dans l'onglet **Isotope pattern** de la boîte de dialogue **Options**.

Chaque filtre simple dispose de deux curseurs de sorte qu'une plage peut être définie. Double-cliquez sur un curseur, puis saisissez directement une valeur.

2. Faites l'expérience des réglages des curseurs et constatez que même les paramètres minimaux inférieurs pour les valeurs **TIC** (par exemple, 1E3) ou **Quality** (1) ont une très forte incidence. Définissez le filtre **TIC** inférieur sur 2e3 et tous les autres sur 0.

Le défaut de masse de la bromocriptine est d'environ 0,22. Il est donc peu probable que les métabolites simples aient des valeurs supérieures ou beaucoup plus basses.

3. Définissez les filtres **Mass Defect** sur 0,18 et 0,23, et notez que les pics restants sont ceux qui avoisinent 4,5 min et 650 Da, et qu'il n'y a qu'un seul point de données avec un rapport  $m/z$  de 652,2211 dans cette zone (4,40 min).
4. Masquez les commandes de filtrage en cliquant sur l'icône à côté de **Filtering Controls**.

---

**Conseil !** Définissez les filtres qui sont visibles en cliquant avec le bouton droit de la souris dans la zone de filtre, en sélectionnant les **filtres**, puis en sélectionnant ceux qui sont appropriés.

---

## Utiliser un spectre de référence

1. Dans le graphique de contour, cliquez sur le point de données à un rapport de 652,2211/4,40 (celui de la bromocriptine), puis cliquez sur l'icône **Définir un spectre de référence (pour mesurer la similitude)**.

---

**Remarque :** Il peut être nécessaire de commencer par agrandir le graphique.

---

2. Cliquez sur la flèche en regard de l'icône **Définir un spectre de référence (pour mesurer la similitude)** et assurez-vous que la case **Overlay Reference Spectrum** est sélectionnée.
3. Définissez le point de données sur le rapport 654,2185/4,39.

Une fois le spectre de référence défini et la case **Overlay Reference Spectrum** sélectionnée, tous les spectres affichés ont également le spectre de référence superposé pour pouvoir les comparer facilement. Cette action est utile lorsque vous utilisez des métabolites, car elle permet de déterminer rapidement les pics décalés de ceux qui ne le sont pas.

Nous avons défini comme référence le spectre MS/MS de l'ion précurseur pour l'isotope du brome à la masse la plus faible et nous avons superposé le spectre de l'isotope à la masse plus élevée. Par conséquent, la vue est semblable à celle générée

## Tutoriel pour Explorer

---

précédemment pour le pic 668,2. Les ions contenant du brome peuvent alors être identifiés par des pics éloignés de deux Da.

4. Cliquez sur l'icône **Développe le volet actif pour remplir la fenêtre**, puis dans le graphique de contour, cliquez sur **Table** (juste en dessous de **Filtering Controls**).

---

**Remarque** : Si nécessaire, déplacez le volet du spectre en dessous du tableau (à l'aide de la fonction glisser-déposer pour réorganiser l'icône des volets) pour que toutes les colonnes soient visibles.

---

Le tableau affiche les mêmes informations que l'explorateur graphique, mais fournit des détails supplémentaires. Il répond également aux commandes de filtrage pour que les deux vues contiennent le même spectre. Le tableau est lié à la vue du spectre de sorte que la sélection de lignes entraîne la mise à jour du spectre. En outre, vous pouvez trier les lignes en cliquant sur les en-têtes de colonnes.

Lorsqu'un spectre de référence est défini, deux colonnes supplémentaires s'affichent : **Delta m/z** indique la différence entre la masse du précurseur de la référence et le spectre correspondant à la ligne. **Similarity** indique la similitude des deux spectres.

5. Cliquez sur **Delta m/z** pour trier le tableau. Vous constaterez que plusieurs pics sont écartés d'environ 15,995 (masse d'oxygène) et qu'un pic est à 31,990 (O<sub>2</sub>). Il s'agit probablement de métabolites d'hydroxy-bromocriptine.
6. Cliquez sur une ligne du tableau pour afficher les spectres associés.

---

**Remarque** : Ces spectres présentent des valeurs de similitudes élevées, tout comme les balayages avec des masses précurseurs de deux Da en plus, qui sont obtenus à partir d'ions contenant du <sup>81</sup>Br.

---

## Résumé

Dans cette section, les tâches suivantes sont abordées :

- Examen d'un fichier IDA à l'aide des vues graphiques et tabulaires d'IDA Explorer.
- Fusion des spectres associés après avoir déterminé que cette action est nécessaire.
- Filtrage du nombre de spectres affichés à l'aide des filtres TIC et de défaut de masse.
- Superposition des spectres à des fins de comparaison.
- Définition d'un spectre de référence et utilisation du tableau pour trouver des métabolites potentiels.

Ces opérations sont fondamentales pour le traitement des données IDA.

La section suivante décrit comment utiliser les outils de structure à l'aide du spectre MS/MS de la bromocriptine.

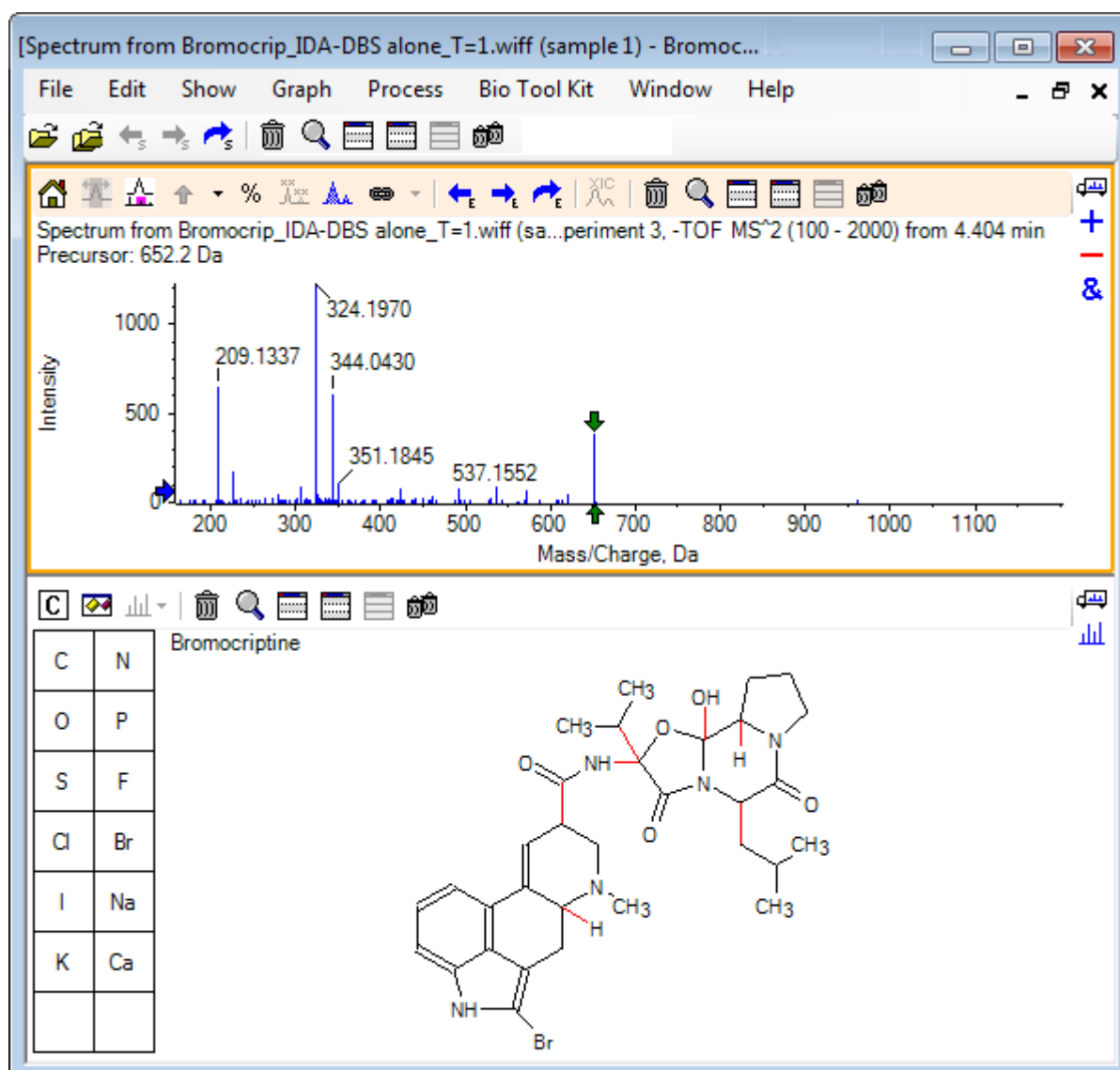
## Utiliser des outils de structure

Le logiciel contient des outils qui permettent de relier les masses des ions à des structures (fichiers .mol) et d'explorer des sites potentiels pour les biotransformations.

## Associer une structure à un spectre MS/MS

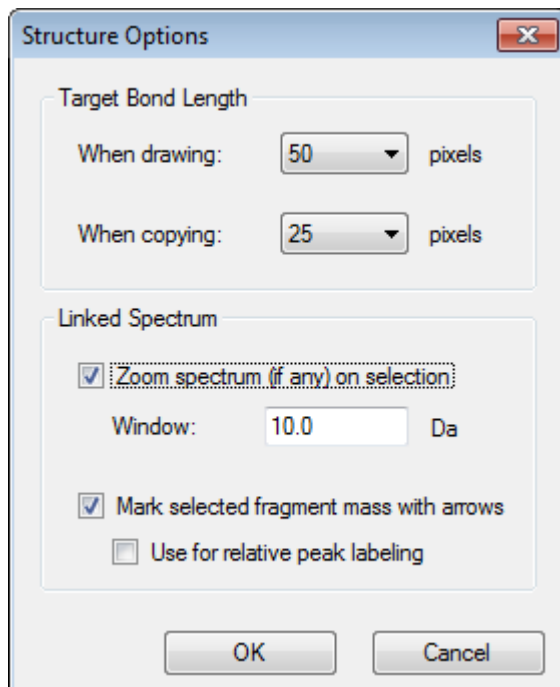
1. Localisez le spectre MS/MS de la bromocriptine, 652,2211/4,40. Consultez la section [Utiliser IDA Explorer](#).
  2. Cliquez sur l'icône **Masque tous les autres volets** dans le graphique de contour pour n'afficher que le spectre.
  3. Cliquez sur **File > Open Mol File**.
  4. Dans la boîte de dialogue **Select Mol File**, sélectionnez le fichier **Bromocriptine.mol**, puis cliquez sur **Open**. Pour des informations sur l'emplacement des fichiers de données installés, consultez la section [Société](#).
- Un nouveau volet s'ouvre sous le spectre pour afficher la structure et les outils.

**Illustration D-45 : Structure de la bromocriptine**



- Ouvrez la boîte de dialogue **Show options** dans le volet de structure, assurez-vous que les cases **Zoom spectrum (if any) on selection** et **Mark selected fragment mass with arrows** sont sélectionnées, puis cliquez sur **OK**. Les autres paramètres n'ont pas besoin d'être modifiés.

**Illustration D-46 : Boîte de dialogue Structure Options**



Le spectre et la structure sont automatiquement associés, car le spectre était actif lors de la création du volet de structure. Associez manuellement une structure à un spectre en faisant glisser l'icône **Affiche un spectre pour la sélection** vers le spectre approprié.

Lorsque vous effectuez un glissement dans le volet de structure, vous déplacez une ligne (un lasso) sur le curseur, ce qui vous permet de sélectionner tout ou partie de la structure qui s'affiche ensuite en caractères gras. Étant donné qu'un spectre est associé, celui-ci s'agrandit et défile pour afficher la zone autour de la masse de la sous-structure sélectionnée.

- Tracez un lasso autour de l'ensemble de la molécule ; la vue affiche le pic à un rapport  $m/z$  de 652,2177, qui correspond à l'ion  $(M - H)^-$ .

Étant donné que vous avez sélectionné la case **Mark selected fragment mass with arrows**, une flèche rouge est tracée au-dessus et au-dessous du pic, indiquant qu'il s'agit de la masse attendue d'un ion correspondant à la zone sélectionnée (à savoir  $(M - H)^-$ , car ces données sont en mode négatif).

---

**Remarque :** Le titre du volet de structure indique la composition élémentaire et la masse du composé neutre correspondant à la sélection (à savoir,  $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$  avec une masse de 653,2213 Da).

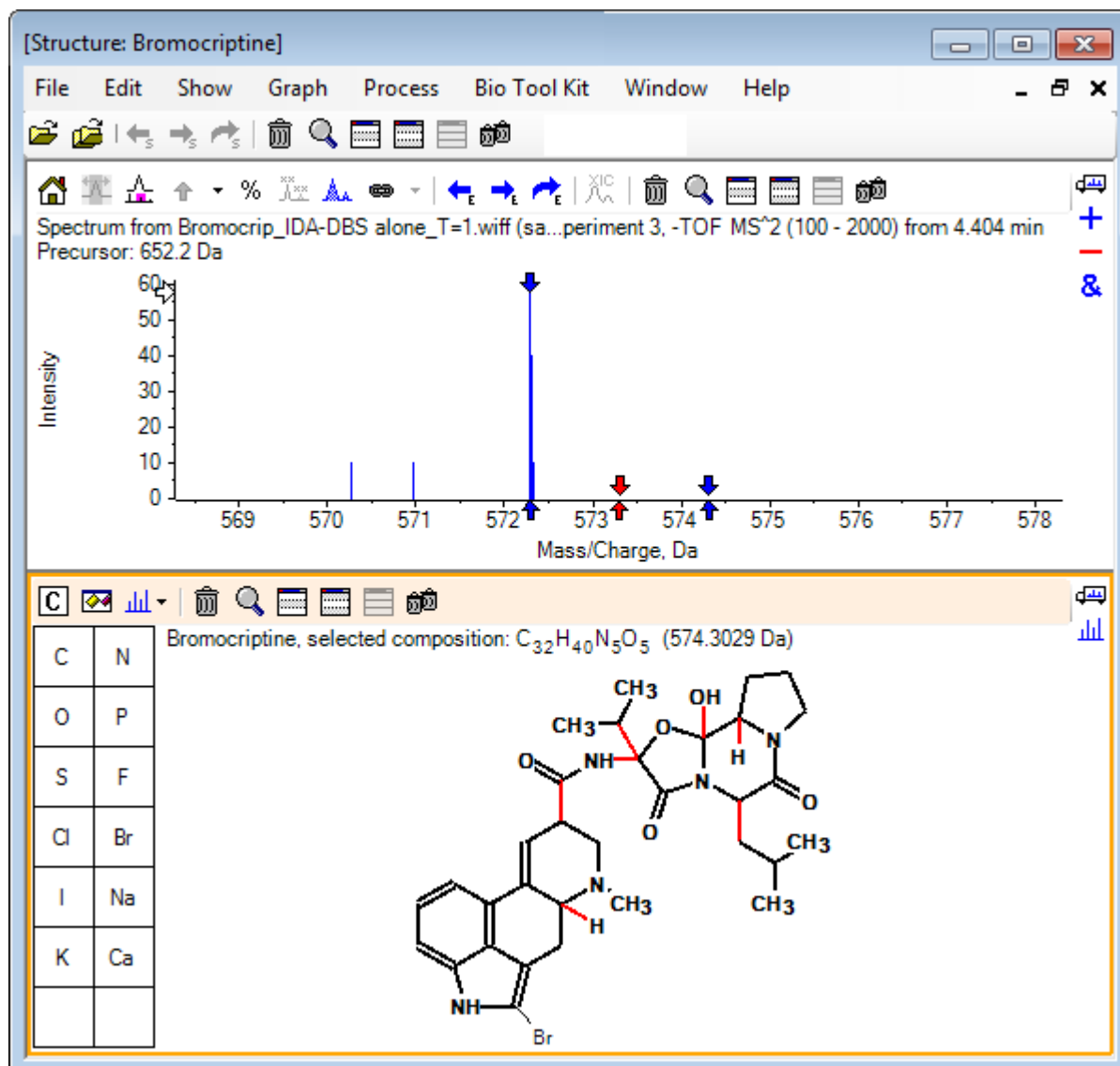
---



Si l'option **Mark selected fragment mass with arrows** est sélectionnée, une flèche verte est alors tracée sur le pic 652,2177 lorsqu'aucune case n'est sélectionnée dans le volet de structure. En effet, la flèche verte marque le complément de la sélection en cours et, si aucune sélection n'est effectuée, le complément correspond à toute la molécule.

7. Sélectionnez la molécule entière à l'exception de l'atome de brome. Reportez-vous à la [Illustration D-47](#).

#### Illustration D-47 : Structure de la bromocriptine



**Remarque :** L'atome de brome est le seul qui s'affiche dans une police normale et dont le titre dans le volet de structure affiche la composition  $C_{32}H_{40}N_5O_5$  avec une masse de 574,3029 Da. Dans le spectre, la flèche rouge indique la masse attendue de la sélection, soit la masse de l'ion moléculaire  $(M - H)^+$  moins la masse du brome. En outre, des flèches distantes de 1 Da sont présentes de chaque côté. Il est fréquent d'acquérir ou de perdre des atomes d'hydrogène supplémentaires lors de la fragmentation. Le logiciel indique cette possibilité en traçant une paire de flèches bleues à +1 et -1 pour chaque rupture de liaison. Dans cet exemple, seule une liaison est rompue. Par conséquent, seulement deux flèches supplémentaires sont présentes.

---

Le pic réel dans le spectre correspond à l'une de ces flèches, indiquant qu'un atome d'hydrogène supplémentaire a été perdu, à savoir HBr, si bien que la masse de l'ion correspond à  $(M - H - HBr)^+$ .

## Utiliser les fragments

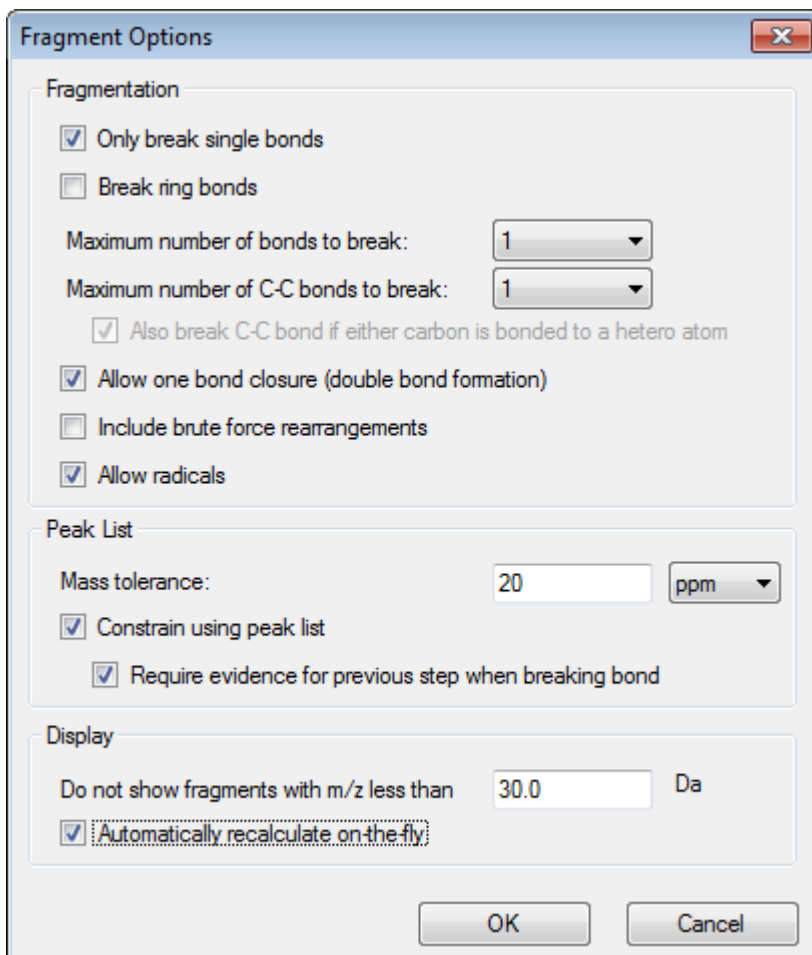
Le logiciel contient un indicateur d'ion fragment qui peut générer la masse des espèces formées par une rupture de liaisons et par l'ajout ou la suppression d'atomes d'hydrogène.

**Remarque :** Cet indicateur est purement arithmétique, n'utilise pas de logique chimique et tend à surestimer les fragments générés. Il s'agit toutefois d'un outil utile pour l'analyse des fragments.

---

1. Avec le volet de structure actif, cliquez sur **Show > Fragments Pane**. Une barre de progression peut apparaître selon les paramètres de la boîte de dialogue **Fragment Options**. Reportez-vous à la [Illustration D-48](#).
2. Cliquez sur l'icône **Options d'affichage**, définissez les paramètres comme indiqué dans [Illustration D-48](#), puis cliquez sur **OK**.

## Illustration D-48 : Boîte de dialogue Fragment Options



Définissez les options de sorte à générer un petit ensemble de fragments simples, puis augmentez le nombre et le type de liaisons rompues nécessaires pour expliquer les ions observés. La rupture de nombreuses liaisons ralentit le programme et génère un grand nombre de fragments peu vraisemblables.

La plupart des paramètres de la boîte de dialogue **Fragment Options** sont décrits dans le *Guide de référence*, mais veuillez noter ce qui suit :

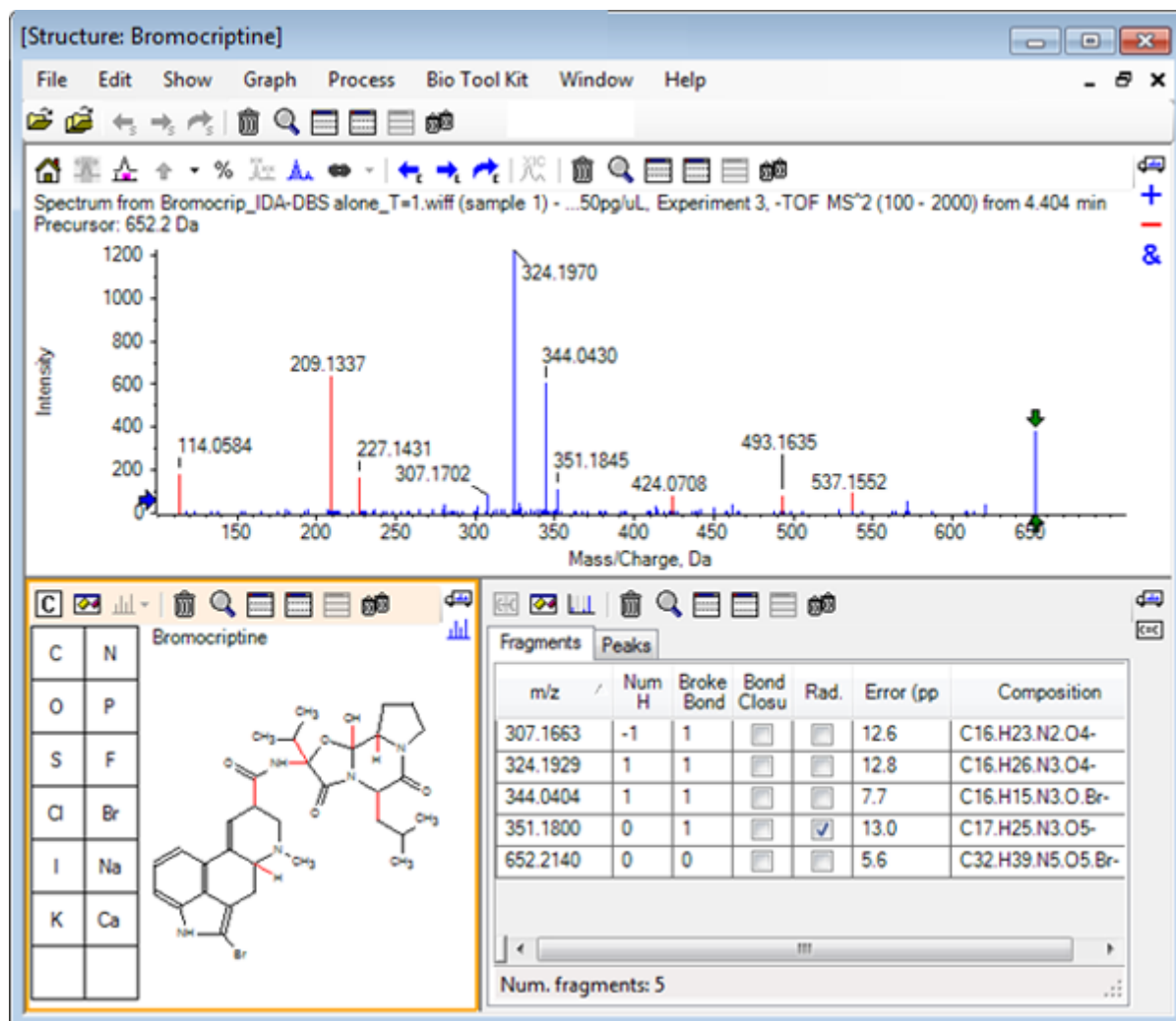
- Si la case **Automatically recalculate on-the-fly** est sélectionnée, toute modification du spectre (le passage à un autre, réglage des paramètres) ou toute sélection entraîne le recalcul des fragments. Ce comportement est généralement souhaité, mais peut avoir un impact sur la vitesse de l'analyse si les options sont définies pour générer de nombreux fragments. Si cette option n'est pas utilisée, cliquez sur l'icône **Fragment**.
- La case **Constrain using peak list** signifie que le logiciel affiche uniquement les fragments correspondant à des pics dans le spectre avec la tolérance appropriée.
- La case **Require evidence for previous step when breaking bond** est efficace uniquement si plusieurs liaisons sont rompues. Le programme rompt tout d'abord une

## Tutoriel pour Explorer

liaison et envisage de rompre des liaisons dans les pièces obtenues. Si cette option est sélectionnée, des ions doivent correspondre aux pièces avant leur rupture.

Avec ces paramètres, la vue devrait ressembler à la [Illustration D-49](#), mais elle peut être légèrement différente, car seuls les pics au-dessus du paramètre de seuil (également marqué) sont pris en compte.

### Illustration D-49 : Structure de la bromocriptine



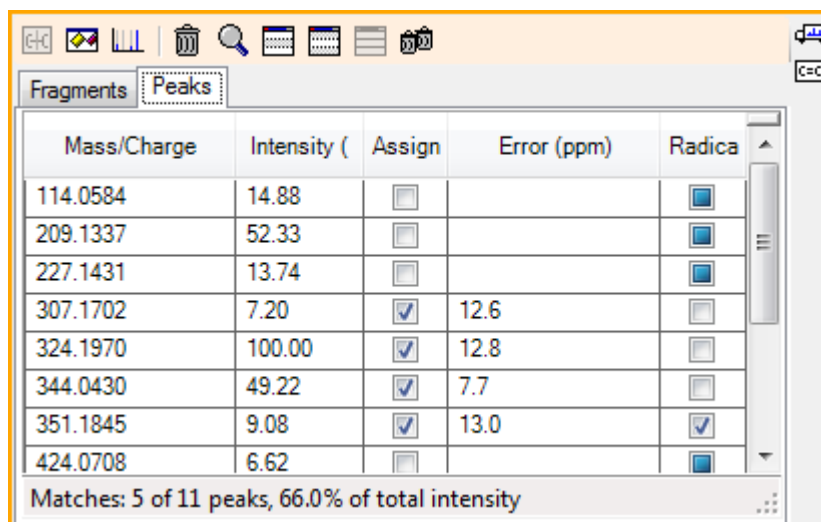
**Remarque :** Les pics dans le spectre sont en couleurs : les pics affectés sont en bleu et les pics non affectés sont en rouge et correspondent aux pics dans l'onglet Fragments.

Le volet Fragments contient deux onglets :

- **Fragments** : dans cet exemple, la liste est courte, car peu de fragments sont générés dans ces conditions. De plus, seuls quelques-uns correspondent aux pics dans le spectre, comme requis, car la case **Constrain using peak list** a été sélectionnée.

- **Peaks** : affiche un tableau énumérant les pics dans le spectre qui sont au-dessus du seuil, leurs intensités et leur affectation, le cas échéant, à un fragment. Pour les pics affectés, l'erreur de masse est également indiquée.

#### Illustration D-50 : Volet Fragments

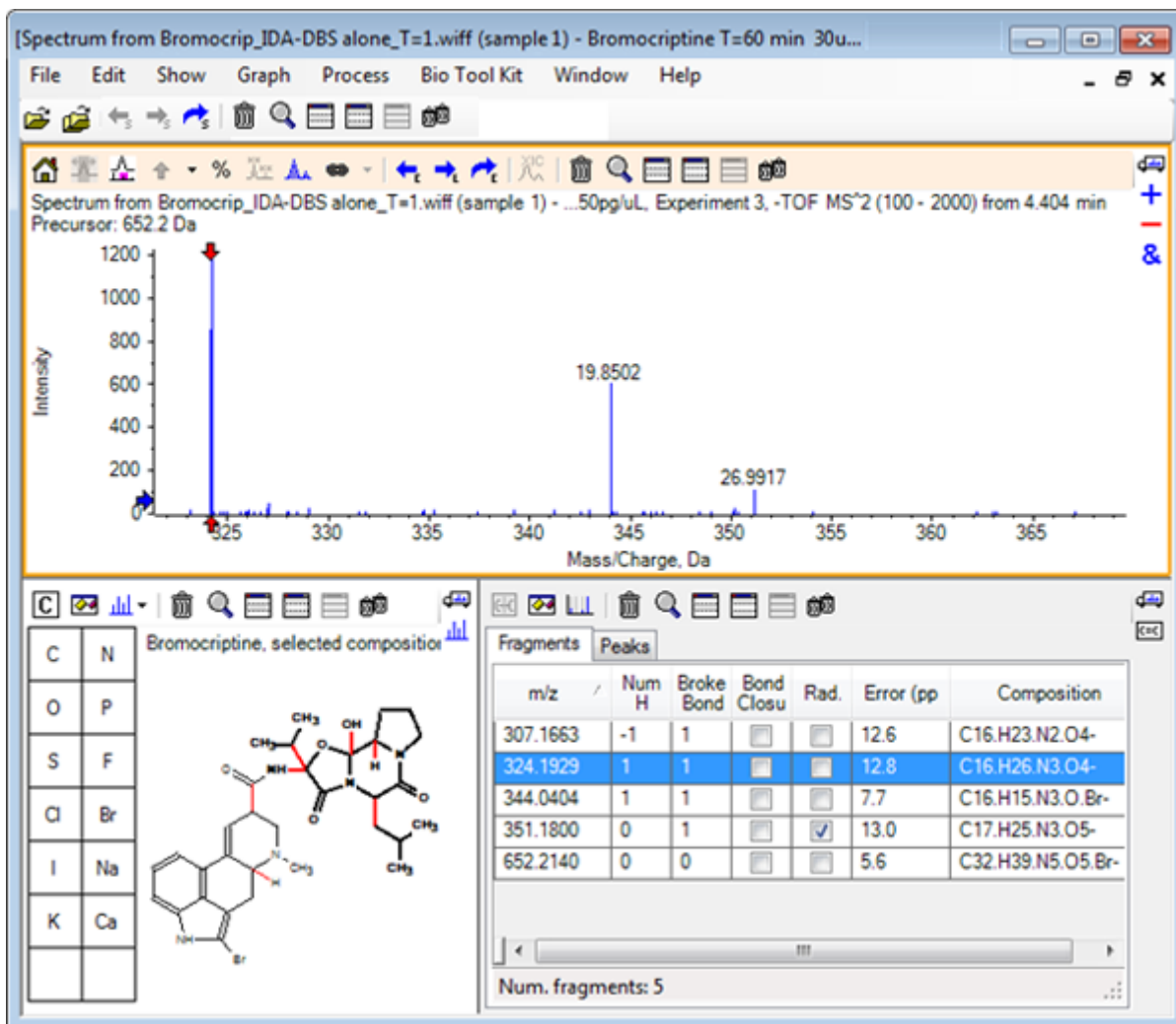


Mass/Charge	Intensity (	Assign	Error (ppm)	Radica
114.0584	14.88	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
209.1337	52.33	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
227.1431	13.74	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
307.1702	7.20	<input checked="" type="checkbox"/>	12.6	<input type="checkbox"/>
324.1970	100.00	<input checked="" type="checkbox"/>	12.8	<input type="checkbox"/>
344.0430	49.22	<input checked="" type="checkbox"/>	7.7	<input type="checkbox"/>
351.1845	9.08	<input checked="" type="checkbox"/>	13.0	<input checked="" type="checkbox"/>
424.0708	6.62	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>

Matches: 5 of 11 peaks, 66.0% of total intensity

3. Dans l'onglet **Fragments**, sélectionnez la ligne correspondant à un rapport  $m/z$  de 324,1929. Le pic est marqué par une flèche rouge pour indiquer qu'il s'agit de la masse prévue et la sous-structure correspondante apparaît en gras dans le volet de structure.

Illustration D-51 : Boîte de dialogue Fragmentation



**Remarque :** La composition et la masse dans le titre du volet de structure reflètent désormais la masse de l'ion plutôt que celle du neutre.

- Examinez les structures attribuées pour les autres fragments.

Elles sont toutes associées à la liaison amide centrale qui sépare les deux parties cycliques de la molécule et semble possible.

**Remarque :** Les compositions élémentaires affectées sont compatibles avec les spectres superposés qui ont été générés dans [Utiliser un spectre de référence](#), où la présence de Br dans des fragments a été déduite par la comparaison des spectres de <sup>79</sup>Br- et de <sup>81</sup>Br- contenant des ions moléculaires.

- Agrandissez le spectre pour rendre visible l'ensemble de la gamme de masses. Deux des principaux pics sont affectés, le rapport  $m/z$  de 324,1970 et le rapport  $m/z$  de 344,0430. Ils correspondent aux deux côtés de la molécule et sont dessinés en bleu. Cependant, un certain nombre de pics ne sont pas encore affectés.

6. Ouvrez la boîte de dialogue **Options**, puis définissez le champ **Maximum number of bonds to break** sur **2**.

---

**Remarque :** Selon le réglage du seuil, cette action peut entraîner l'affectation de certains petits pics, mais pas des pics les plus abondants (*rappports  $m/z$*  de 114,0584 ; 209,1337 et 227,1431, par exemple). Si le spectre est marqué par rapport à une flèche rouge, cliquez dans le volet de structure afin d'effacer toute sélection et d'indiquer les valeurs de masse absolues.

---

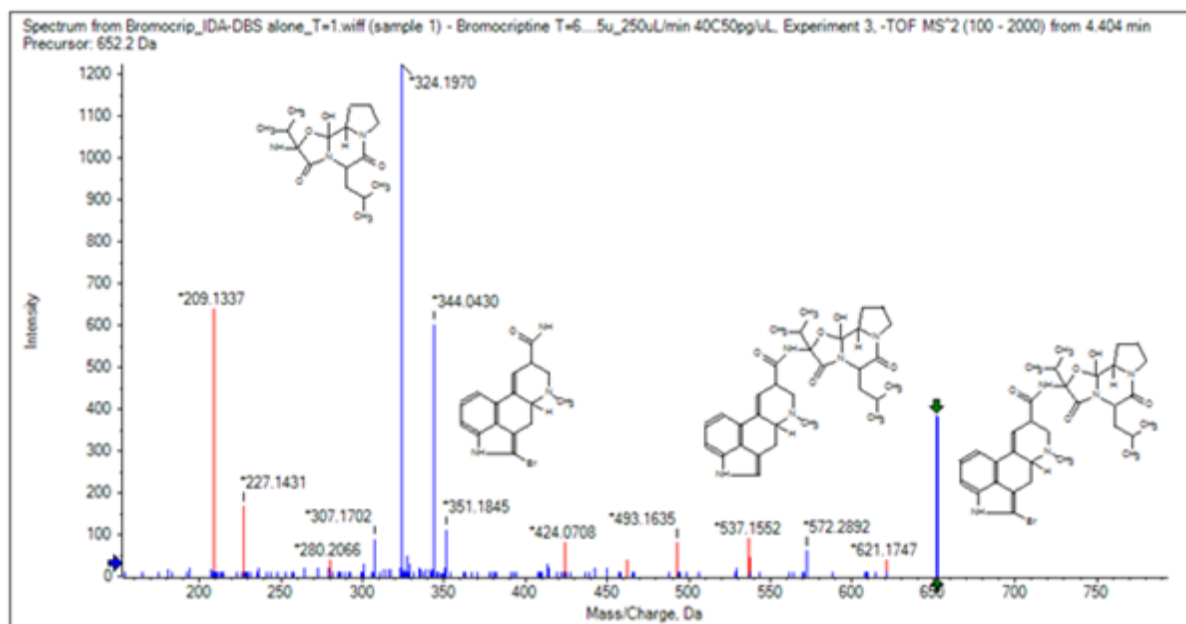
7. Sélectionnez la case **Break ring bonds**, puis cliquez sur **OK**.  
Un certain nombre d'ions supplémentaires sont désormais mis en correspondance, y compris ceux à des rapports  $m/z$  de 209,1337 et de 227,1431. La sélection des nouvelles masses dans le volet **Fragments** pour la mise en surbrillance des sous-structures indique qu'elles sont associées à des ruptures de cycles dans la partie peptide cyclique de la molécule. Ces ions sont susceptibles d'être utiles pour déterminer les sites de transformation métabolique dans cette zone.

## Ajouter des sous-structures à un spectre

Sélectionnez des parties de la structure, puis utilisez-les afin d'annoter le spectre pour référence ultérieure. Selon la taille du volet du spectre, utilisez la boîte de dialogue **Options** dans le volet de structure pour définir la valeur **Target Bond Length** à des fins de copie.

1. Dans la boîte de dialogue **Fragment Options**, désélectionnez la case **Break ring bonds** pour réduire le nombre de fragments.
2. Dans le volet de fragments, sélectionnez une ligne correspondant à l'un des ions les plus abondants pour mettre en surbrillance la sous-structure correspondante.
3. Cliquez dans le volet de structure.
4. Cliquez sur **Edit > Copy**.
5. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans un volet du spectre actif, puis cliquez sur **Paste Image**.  
Cette action permet de coller une image de la sous-structure dans le volet de spectre.
6. Déplacez l'image en la faisant glisser vers l'endroit désiré. Vous pouvez supprimer complètement une image en cliquant dessus avec le bouton droit de la souris, puis en sélectionnant **Delete Image**.  
Les images sont reliées au spectre, c'est-à-dire aux positions de l'intensité de masse. Elles sont donc déplacées lorsque vous effectuez des opérations d'agrandissement et de défilement.
7. Répétez les étapes 2 à 6 pour les autres ions fragments pour générer une image finale semblable à la [Illustration D-52](#).

### Illustration D-52 : Spectre avec sous-structures ajoutées



8. Cliquez sur **File > Print > Print Preview Window** pour vérifier la position des sous-structures.  
Étant donné que les ions appariés sont tracés en bleu, il est facile de les associer aux structures correspondantes.
9. Copiez l'image, puis collez-la dans un logiciel de dessin pour ajouter des lignes ou d'autres caractéristiques.

## Utiliser les spectres MS/MS connexes

Dans certaines applications, il est utile de pouvoir comparer le spectre d'un composé modifié, un métabolite par exemple, au spectre et à la structure du composé précurseur.

1. Utilisez IDA Explorer pour afficher de nouveau le graphique de contour. Sélectionnez le pic à 668,2176/4,21, puis masquez le graphique de contour.

Étant donné que les volets de la structure et des fragments sont liés au spectre, ils ont été mis à jour pour refléter le nouveau spectre. Toutefois, la structure est la même que celle du composé précurseur lors de l'acquisition du spectre depuis un composé avec un atome d'oxygène supplémentaire (16 Da plus élevé en masse). Dans de nombreux cas, il y a encore des correspondances qui indiquent les parties de la molécule qui n'ont pas changé, mais dans cet exemple, aucun des ions importants ne correspond, et ils sont tracés en rouge.

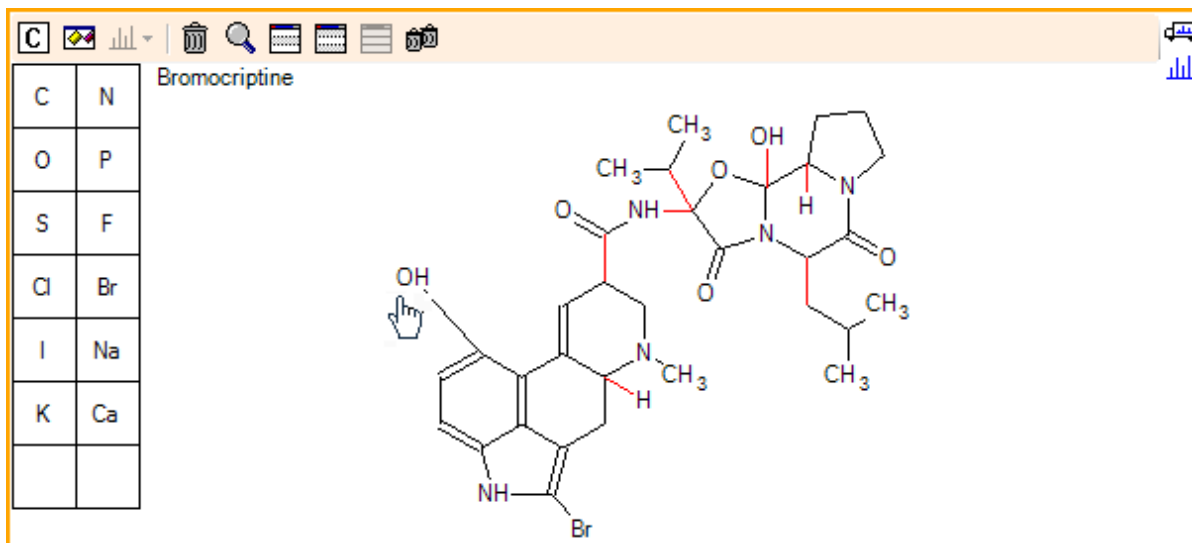
Le volet de structure contient des outils simples de dessin qui permettent de modifier la structure pour voir s'il est possible de trouver des correspondances.

2. Le côté gauche du volet de structure comprend une grille avec des symboles d'éléments. Cliquez sur **O**, puis faites-le glisser vers la structure principale. Lorsque l'atome se trouve à proximité de la structure, il est relié par une liaison qui suit le curseur lorsque vous le faites glisser à proximité de la structure.



- Faites glisser le symbole **O** pour tracer une liaison vers la partie inférieure de la structure (ergoline), puis relâchez le bouton de la souris (par exemple, placez le nouvel atome sur le cycle phényle). La [Illustration D-53](#) illustre le processus.

#### Illustration D-53 : Volet de structure

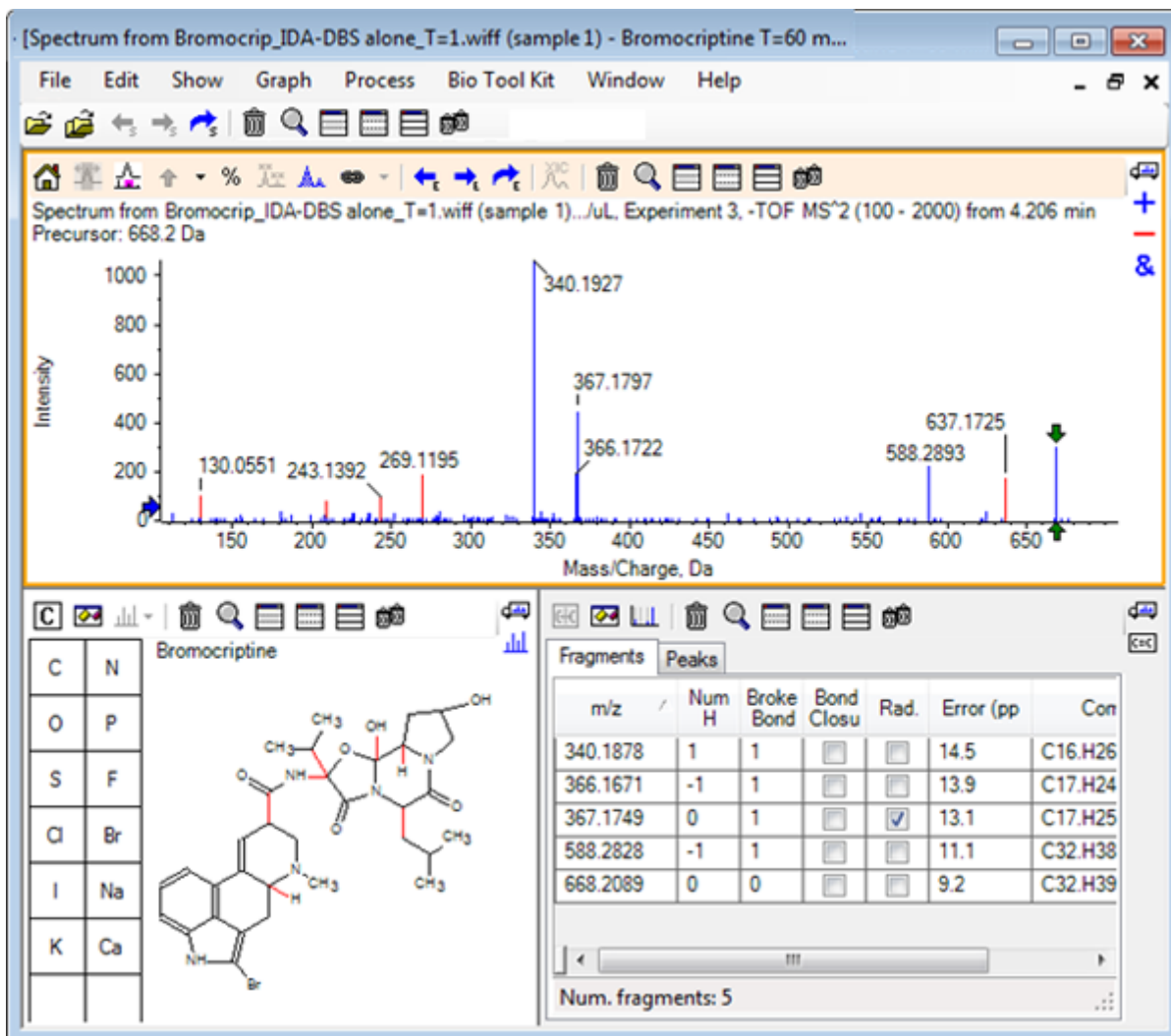


Le spectre est à nouveau actualisé et révèle deux correspondances : l'ion moléculaire à 668,2089 et l'ion correspondant à la perte de HBr à 588,2828. Cela laisse à penser que la composition élémentaire globale est maintenant correcte. Toutefois, le fait que les grands fragments ne correspondent pas porte à croire que l'atome n'a pas été ajouté à la partie droite de la molécule.

- Cliquez sur le groupe **OH** qui vient d'être ajouté, puis faites-le glisser vers le cycle pyrrolidine dans la partie supérieure de la structure. Assurez-vous que seul l'atome déplacé est tracé en gras. Sinon, l'ensemble de la sous-structure en surbrillance est déplacé.

Comme illustré à la [Illustration D-54](#), cette action entraîne la mise en correspondance des ions à 340,1927, 366,1722 et 367,1797, et les sous-structures correspondantes sont des formes hydroxylées d'ions mises en correspondance dans le spectre du composé précurseur.

Illustration D-54 : Spectre de la bromocriptine



De nombreux pics à masse faible sans correspondance étaient présents dans le spectre précurseur, ou bien sont des équivalents hydroxylés qui ont été mis en correspondance lorsque l'algorithme a été autorisé à rompre les liaisons de cycle. Cependant, il existe un ion de masse élevée à 637,1725 qui est probablement dû à une étape de fragmentation simple et qui est encore sans correspondance.

5. Dans l'onglet **Fragments**, sélectionnez la ligne 668,2089 pour la marquer, ainsi que pour marquer les autres ions par rapport à elle.  
Cela montre que le pic à 637,1725 correspond à la perte de 31,0364 de la molécule précurseur qui peut être CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> ou CH<sub>3</sub>O. Étant donné que cet ion n'a pas été examiné dans le spectre de la molécule précurseur, il est très probable qu'il soit issu de l'hydroxylation de l'un des groupes méthyles dans la partie peptide cyclique de la structure.
6. Cliquez deux fois dans le volet de structure pour désélectionner la structure, puis faites glisser le nouveau groupe **OH** vers l'un des groupes méthyles à droite de la structure.

7. Ouvrez la boîte de dialogue **Fragment Options**, définissez la valeur pour **Mass tolerance** sur 30 ppm, puis cliquez sur **OK**.  
L'ion 637 est désormais mis en correspondance et sélectionner cette ligne dans le volet des fragments indique que l'ion pourrait correspondre à la perte d'une fraction de méthoxy.
8. Ouvrez la boîte de dialogue **Fragment Options**, sélectionnez la case **Break ring bonds**, puis cliquez sur **OK**.  
Il est désormais possible de mettre en correspondance la plupart des fragments, même si l'ion à 209 ne peut être mis en correspondance que si trois liaisons peuvent être rompues (les deux liaisons requises pour la molécule précurseur et la perte de l'atome d'oxygène additionnel).

---

**Remarque :** Le volet Fragments contient maintenant plusieurs lignes relatives à certaines masses, par exemple 637, 1905. Chacune de ces lignes correspond à un fragment différent possible (davantage de lignes sont générées si trois liaisons peuvent être rompues). L'onglet Peaks du volet Fragments affiche uniquement la correspondance la plus adaptée selon une combinaison de plusieurs éléments : précision de la masse, nombre de liaisons rompues, fragment radical, etc. Dans cet exemple, la meilleure correspondance est un fragment qui pourrait avoir été généré pour le composé précurseur, mais qui n'a pas été observé. Par conséquent, les options supplémentaires de l'onglet Fragments peuvent être utiles pour proposer des solutions qui ne sont pas évidentes.

---

## Résumé

Dans cette section, les tâches suivantes sont abordées :

- Saisie d'une structure sous la forme d'un fichier .mol et la relier à un spectre.
- Sélection et examen de parties de la structure afin de déterminer la présence éventuelle d'un pic de masse correspondant.
- Génération d'un volet de fragments, puis définition des paramètres pour observer des fragments simples.
- Utilisation des onglets **Fragments** et **Peaks** pour afficher les compositions, les sous-structures et les pics de masse correspondants.
- Modification des **Fragment Options** pour permettre plusieurs structures de fragmentation complexes.
- Ajout de sous-structures à un volet de spectre.
- Modification de la structure pour explorer la fragmentation de molécules associées comme les métabolites.

En général, il est judicieux de commencer par des fragmentations simples avec des options de fragmentation supplémentaires (liaisons supplémentaires, liaisons de cercle) selon les besoins pour expliquer les ions observés. Cette constatation est cohérente avec le fait que le fragment d'ions se fragmente généralement en plusieurs étapes, avec la formation de fragments plus simples en premier, plutôt qu'en une étape concertée qui rompt plusieurs liaisons. De toute évidence, un fragment simple risque d'être instable et de se fragmenter

encore davantage immédiatement de sorte qu'il ne soit plus possible de l'observer. En outre, exécuter un grand nombre d'étapes de fragmentation requiert plus de temps de traitement et de réalisation.

Lorsque l'on compare des molécules apparentées, il peut être utile de superposer le spectre de référence (molécule précurseur) et la forme modifiée, puis de relier la vue à un volet de structure ou de fragments qui se met à jour lors de l'échange du spectre actif. Cependant, il peut s'avérer difficile de distinguer la couleur appliquée aux ions avec et sans correspondance en cas de superpositions. Il est donc recommandé d'utiliser des spectres uniques jusqu'à ce que vous vous soyez familiarisé avec le programme et les vues.

## Utiliser plusieurs échantillons

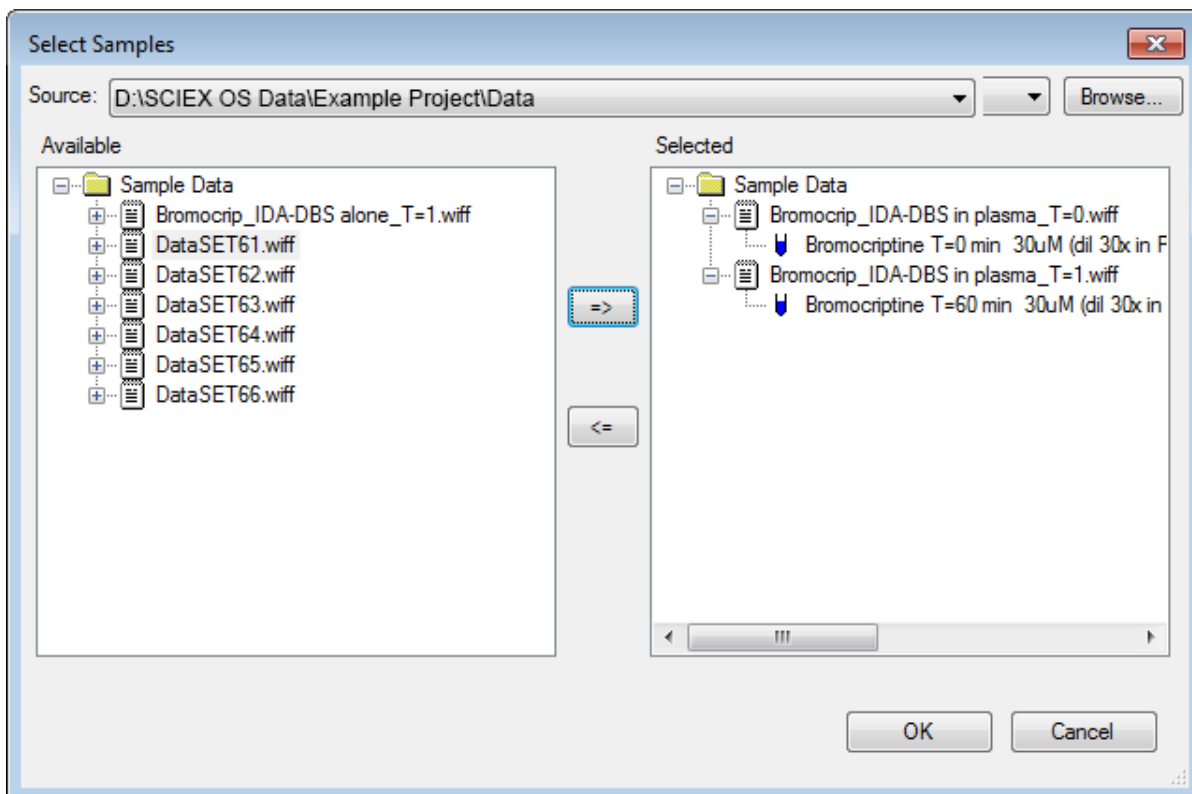
Bien qu'il soit fréquent d'utiliser un seul échantillon, il arrive parfois d'acquérir des informations supplémentaires en comparant et en visualisant plusieurs échantillons à la fois. Cette section illustre certains outils disponibles dans le logiciel pour deux échantillons, puis pour plusieurs échantillons.

### Utiliser deux échantillons

Un processus de travail commun consiste à comparer deux échantillons obtenus dans des conditions différentes pour déterminer les changements. Par exemple, deux repères temporels après l'administration d'un médicament. Les données comparées pour cet exercice (T = 0 heure et T = 1 heure) proviennent d'une incubation de bromocriptine avec des microsomes hépatiques de rat inoculés dans le plasma.

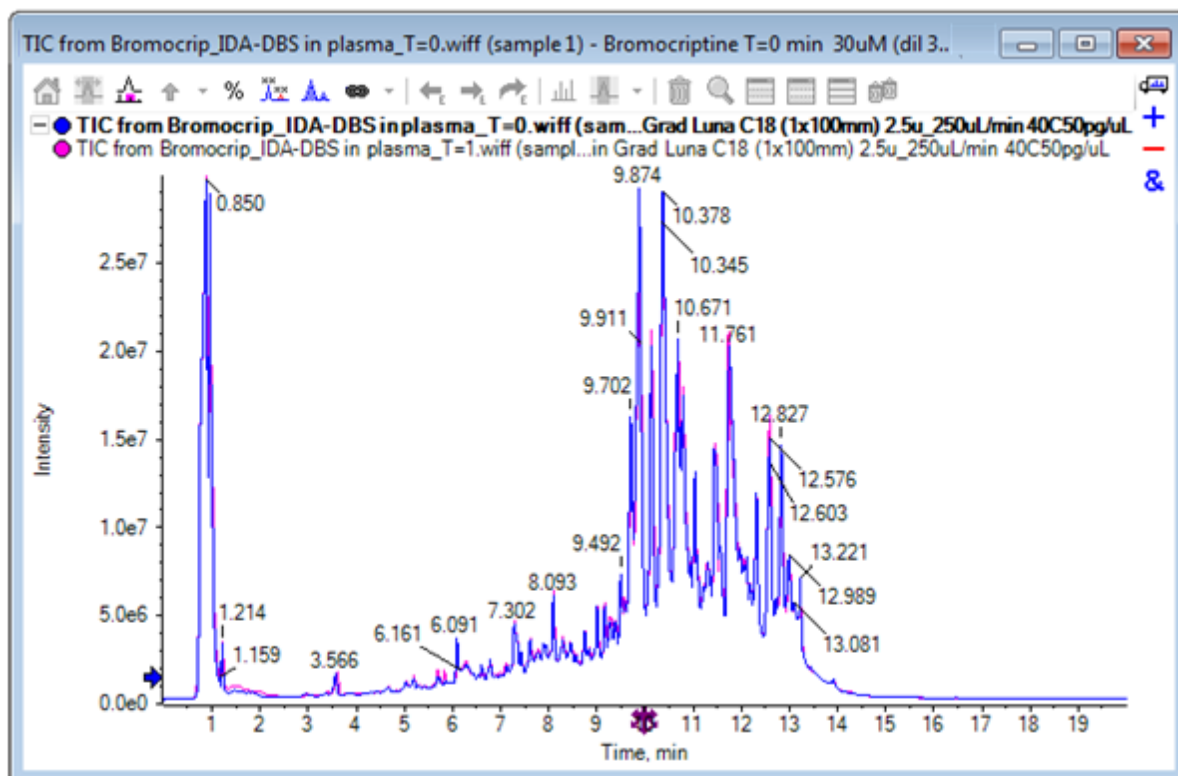
Fermez toutes les fenêtres avant de commencer.

1. Cliquez sur **File > Open Multiple Samples**, puis accédez au dossier contenant les données de l'échantillon.
2. Sélectionnez les fichiers **Bromocrip\_IDA-DBS in plasma\_T=0.wiff** et **Bromocrip\_IDA-DBS in plasma\_T=1.wiff**, puis faites-les glisser à droite de la fenêtre.
3. Cliquez sur **OK**.

**Illustration D-55 : Sélectionner plusieurs échantillons**

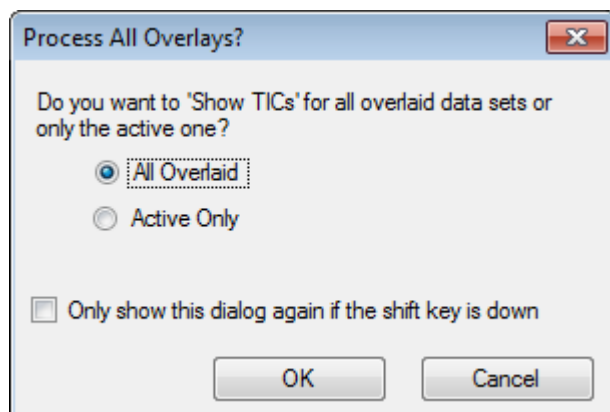
Contrairement à l'ouverture d'un seul fichier IDA où des TIC distincts s'affichent pour l'exploration et les balayages dépendants, en présence de plusieurs fichiers IDA, un seul TIC de toutes les données s'affiche pour tous les échantillons. Dans cet exemple, deux TIC sont représentés comme l'illustre la [Illustration D-56](#).

### Illustration D-56 : TIC



4. Cliquez sur **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** pour ouvrir la boîte de dialogue **Select Experiment**.
5. Sélectionnez **Period 1, Experiment 1 - TOF MS (100 - 2000)**, puis cliquez sur **OK**.

### Illustration D-57 : Boîte de dialogue Process All Overlays

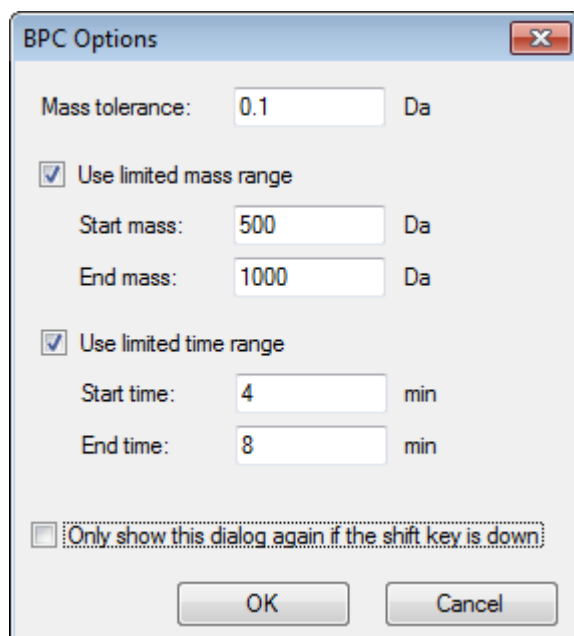


La boîte de dialogue **Process All Overlays**, qui s'affiche lors du traitement de tracés superposés, vous permet de choisir de traiter tous les tracés ou uniquement le tracé actif. Le traitement de tous les tracés est utile, car les opérations ultérieures affectent tous les tracés (échantillons).

6. Sélectionnez **All Overlaid**.

7. Sélectionnez la case **Only show the dialog again if the shift key is down** pour définir cette action par défaut.
  8. Cliquez sur **OK**.  
Un volet contenant les superpositions des TIC d'exploration est alors généré. La chromatographie est très reproductible et les pics des métabolites sont très élevés. Vous pouvez donc trouver certaines superpositions en agrandissant et en comparant les chromatogrammes (en examinant la zone autour de 6 min). En général, des efforts supplémentaires doivent toutefois être déployés. Il existe plusieurs façons de générer des vues qui sont plus facilement comparables. Pour cet exemple, un chromatogramme de pics basique est utilisé.
- 
- Remarque :** Si vous cliquez sur **File > Open Heat Map TICs from Wiff**, vous pouvez générer directement les vues de la bande sans afficher au préalable les chromatogrammes superposés.
- 
9. Masquez le volet TIC d'origine, puis cliquez sur **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.
  10. Dans la boîte de dialogue **BPC Options**, modifiez au besoin les paramètres pour qu'ils correspondent aux valeurs de la [Illustration D-58](#), puis cliquez sur **OK**.

#### Illustration D-58 : Boîte de dialogue BPC Options



Un chromatogramme de pics basique est réalisé en traçant l'intensité du plus grand pic dans chaque balayage en fonction du temps de rétention. Pour fournir des informations supplémentaires, chaque tracé bascule entre sa couleur normale et le gris chaque fois que la masse de pic de base change selon une tolérance de masse supérieure à celle qui est indiquée dans cette boîte de dialogue.

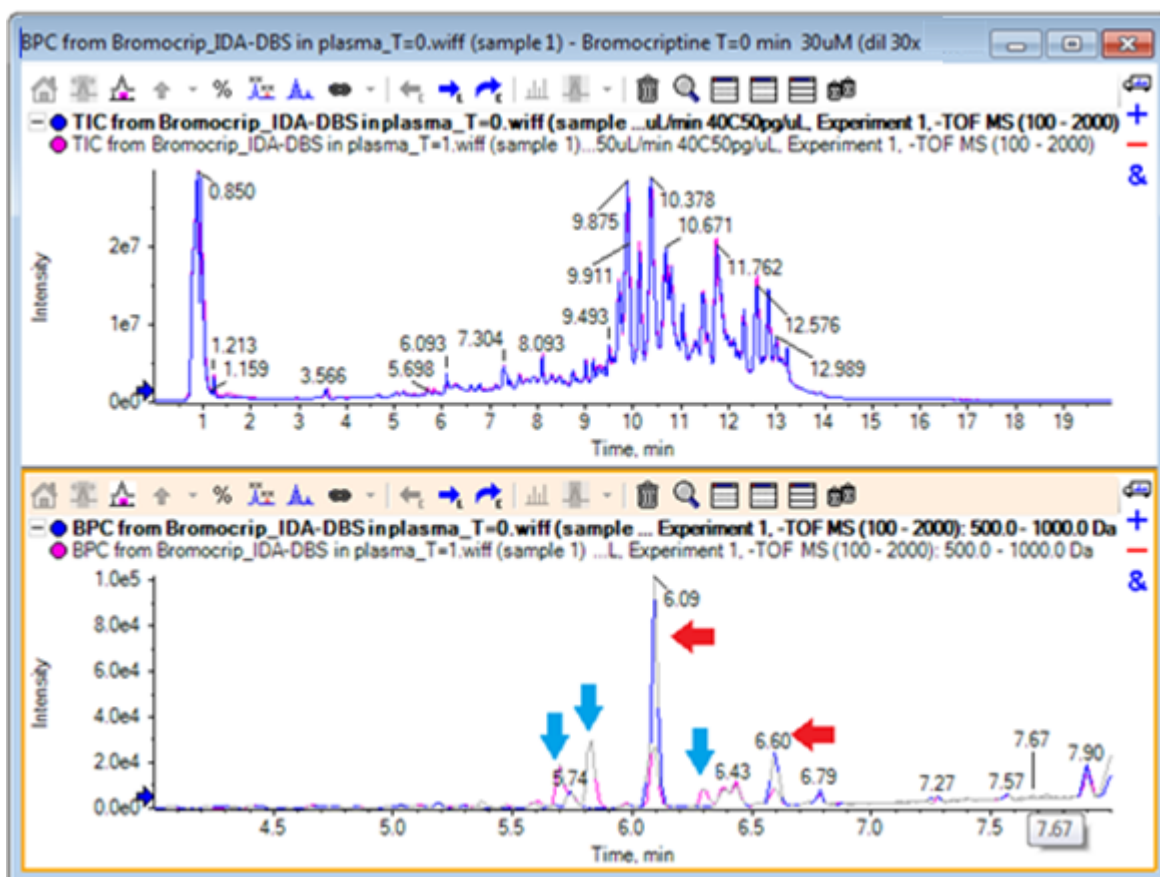
Vous pouvez éventuellement limiter la gamme de masses prise en compte, permettant ainsi d'éviter les artefacts causés par des pics de bruit de fond bruyants par exemple.

## Tutoriel pour Explorer

Vous pouvez également définir la plage de temps de rétention pour accélérer le traitement. Sachant que la masse de la bromocriptine est d'environ 652, les métabolites simples ne sont pas inférieurs à un rapport  $m/z$  de 500.

11. Dans la boîte de dialogue **Process All Overlays**, assurez-vous que l'option **All Overlaid** est sélectionnée, puis cliquez sur **OK**.  
Un nouveau volet affiche le BPC, qui est beaucoup plus simple et plus facile à comparer que les TIC d'origine.

### Illustration D-59 : BPC



Deux pics (marqués par des flèches rouges) semblent diminuer dans l'échantillon de 1 heure (rose) par rapport à l'échantillon T = 0 (bleu). Ils correspondent à la bromocriptine (6,09 min) et à un isomère. Trois pics (flèches bleues) sont également présents dans l'échantillon T = 1, mais pas dans l'échantillon T = 0. Il s'agit de métabolites potentiels.

**Remarque :** Le BPC peut être très utile, mais il ne reflète que le comportement de l'ion le plus élevé (dans la gamme de masses choisie). Il n'est pas possible d'afficher les pics de masse qui ne se transforment jamais en pics de base. Par conséquent, utilisez d'autres outils lorsque vous examinez les différences entre les échantillons.

12. Masquez le volet TIC.
13. Double-cliquez dans le volet BPC à 6,09 min.



14. Sélectionnez **All Overlaid** dans la boîte de dialogue **Process All Overlays**, puis cliquez sur **OK**.

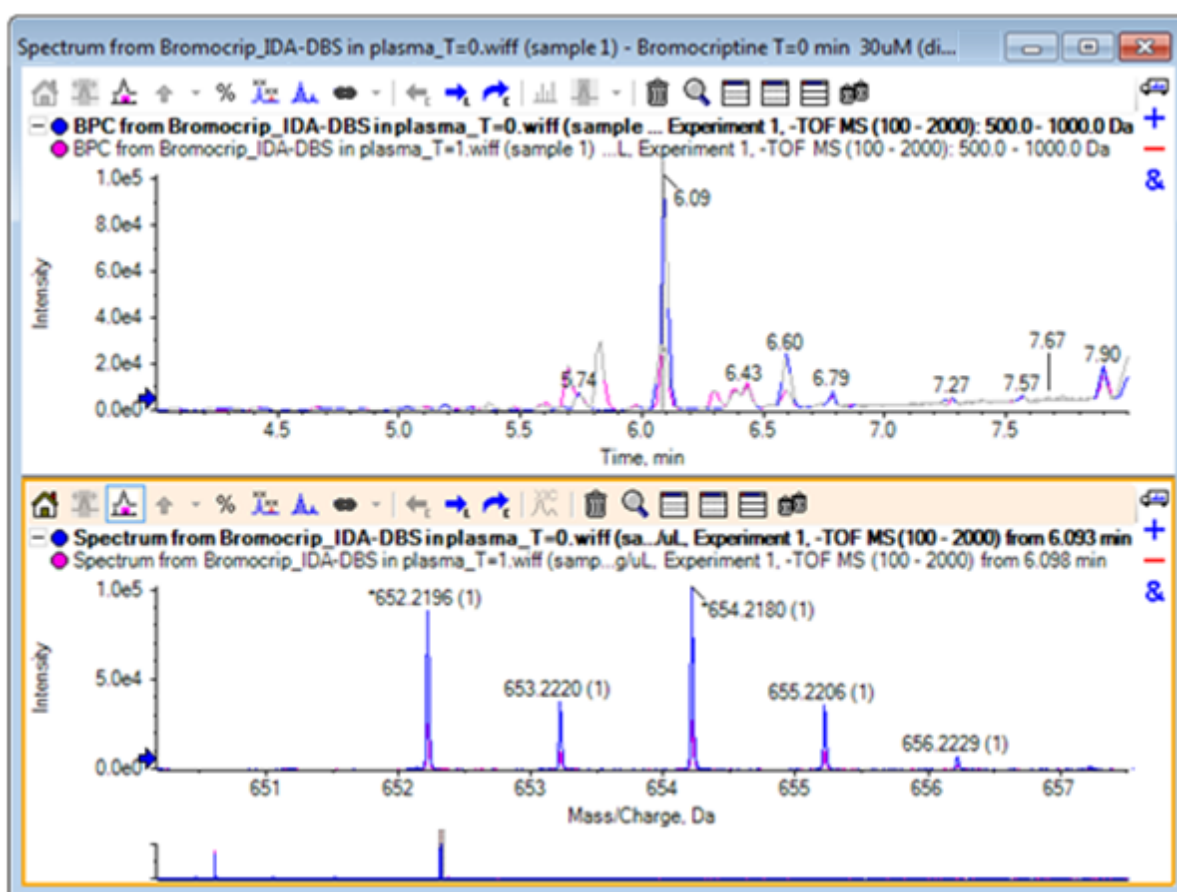
Ceci génère deux spectres superposés.

15. Dans le volet de spectre, cliquez et agrandissez pour afficher l'amas isotopique à un rapport  $m/z$  autour de 652. Reportez-vous à la [Illustration D-60](#).

Le volet de spectre comprend des spectres superposés des deux échantillons pour une comparaison plus facile. Dans cet exemple, il est évident que l'intensité dans l'échantillon T = 1 (rose) est inférieure à celle de l'échantillon T = 0.

L'aperçu du graphique est très précieux lors de la consultation des données à haute résolution de ce type, car il permet d'examiner les détails tout en gardant une vue d'ensemble du spectre.

#### Illustration D-60 : Amas isotopique à un rapport $m/z$ autour de 652



16. Dans le volet Chromatogram, déplacez le curseur sur la ligne qui affiche l'heure du spectre (sur lequel vous avez précédemment double-cliqué).

17. Lorsque le curseur se transforme en flèche à double sens, faites-la glisser vers le pic à environ 5,8 min.

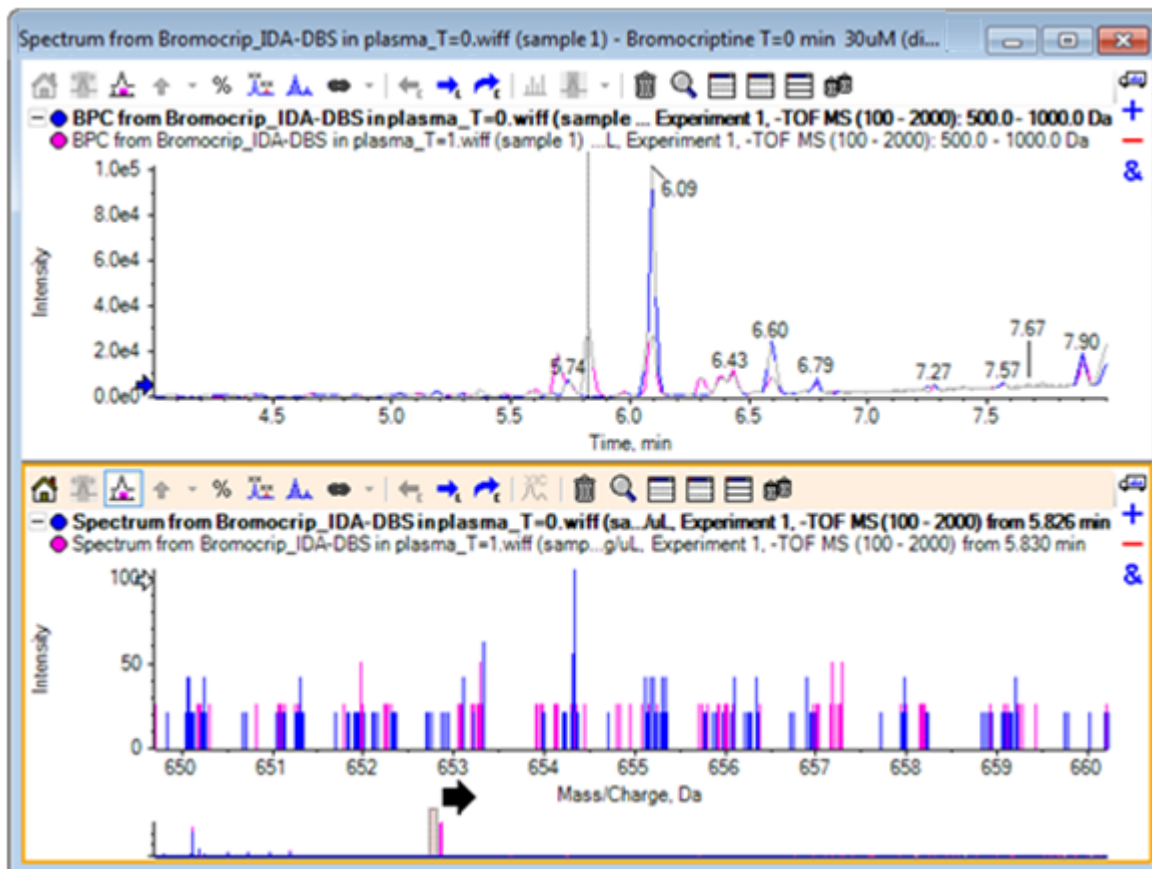
Le spectre continue à afficher la gamme de masses étendue, qui ne contient plus que le bruit et les petits pics. Pour afficher les grands pics roses dans la fenêtre principale,

## Tutoriel pour Explorer

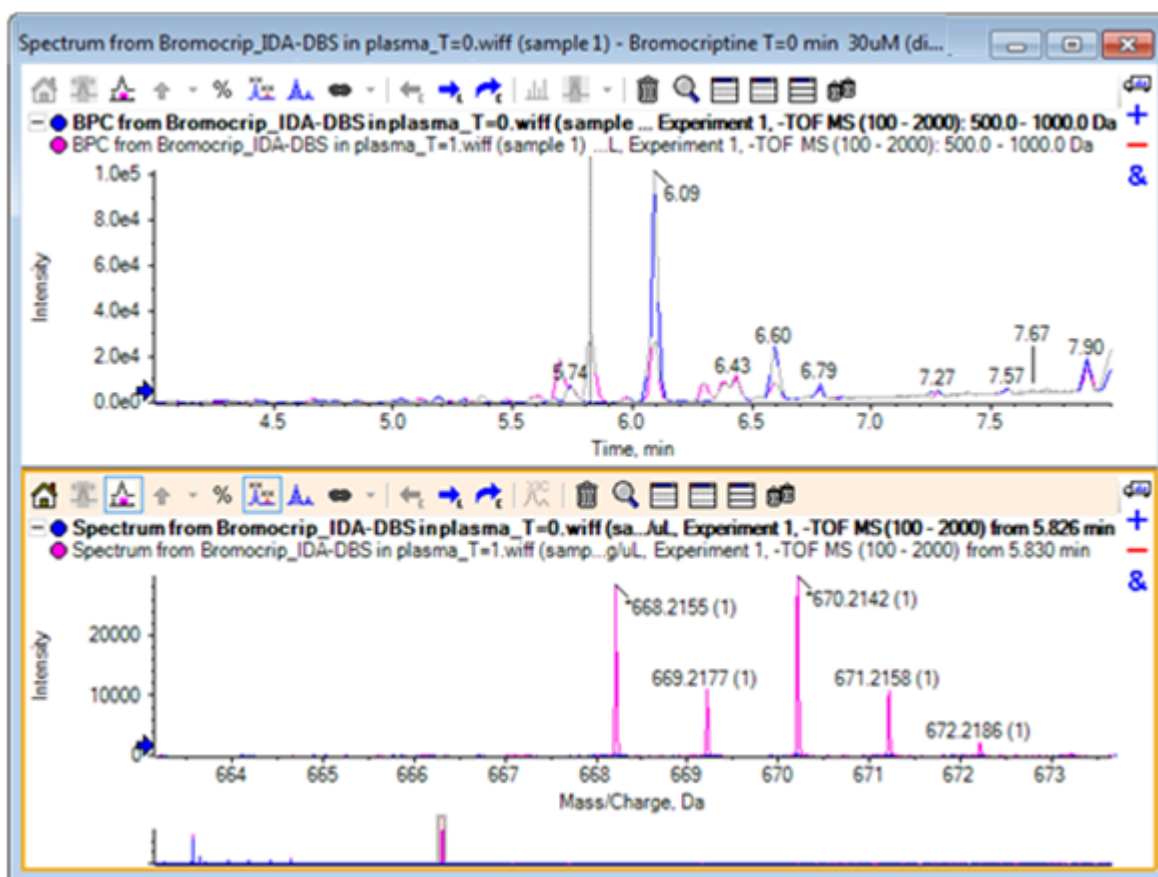
faites glisser le rectangle rose dans l'aperçu du graphique, indiqué par une flèche noire en dessous. La vue est rétablie lorsque vous relâchez la souris.

Dans la [Illustration D-62](#), l'icône **Marquer tous les tracés superposés** a été sélectionnée.

### Illustration D-61 : BPC et spectre



### Illustration D-62 : BPC et spectre avec sélection de l'icône Marquer tous les tracés superposés



Ces pics sont absents de l'échantillon T = 0.

18. Fermez toutes les fenêtres avant de continuer.

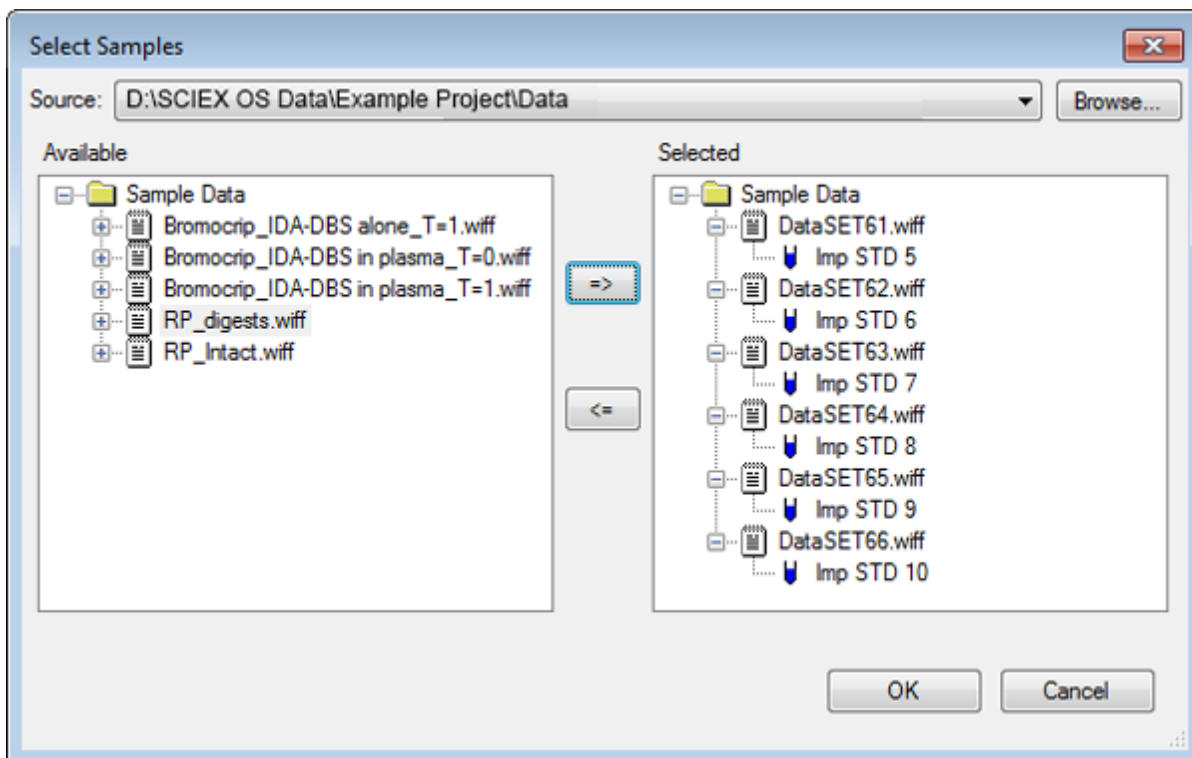
## Utiliser plus de deux échantillons

Lorsque plus de deux échantillons sont superposés, il peut s'avérer difficile de différencier les fenêtres et de les associer au bon échantillon. Le logiciel contient d'autres outils qui vous permettent d'afficher les données de plusieurs échantillons.

L'ensemble de données utilisé pour l'exemple provient d'une analyse de profil d'impureté de six ensembles de données différents.

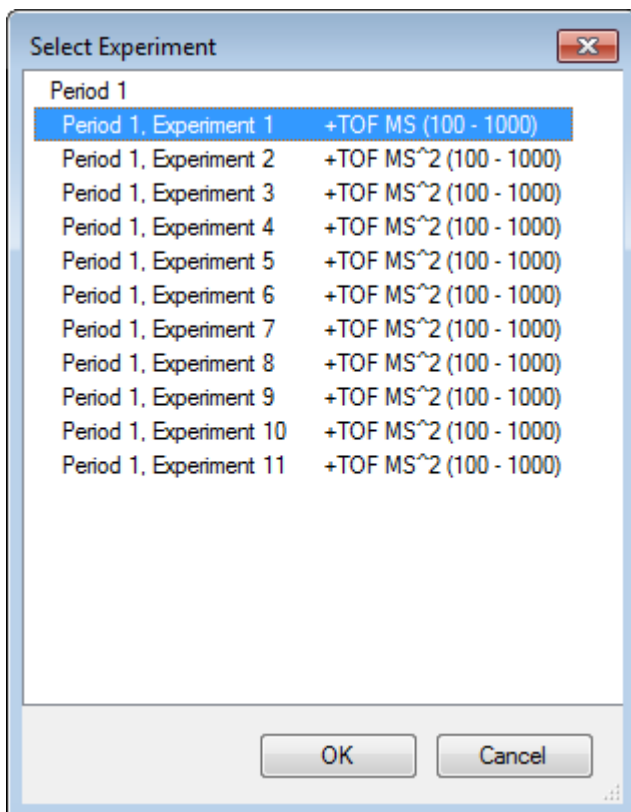
1. Cliquer sur **File > Open Multiple Samples**.
2. Sélectionnez les fichiers **DataSet61.wiff** à **DataSet66.wiff**, puis déplacez-les dans le volet **Selected**.

### Illustration D-63 : Sélection de plusieurs échantillons



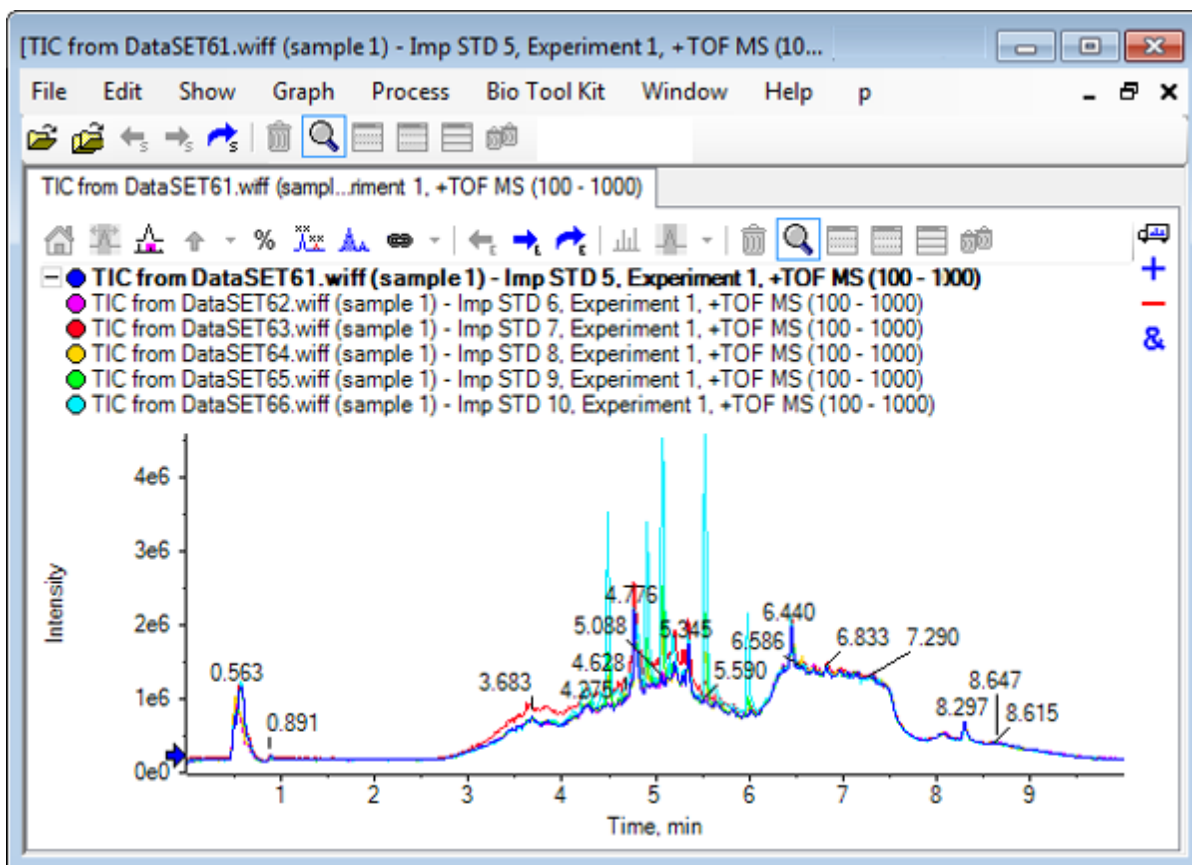
3. Cliquez sur **OK**.
4. Cliquez sur **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
5. Sélectionnez **Period 1, Experiment 1** dans la boîte de dialogue **Select Experiment**.

## Illustration D-64 : Boîte de dialogue Select Experiment



6. Cliquez sur **OK**.
7. Dans la boîte de dialogue **Process All Overlays**, sélectionnez **All Overlaid**, puis cliquez sur **OK**. Le graphique affiche la superposition d'un chromatogramme TIC pour chaque échantillon du fichier.

Illustration D-65 : TIC superposés de l'expérience 1 du fichier DataSet61.wiff à DataSet66.wiff



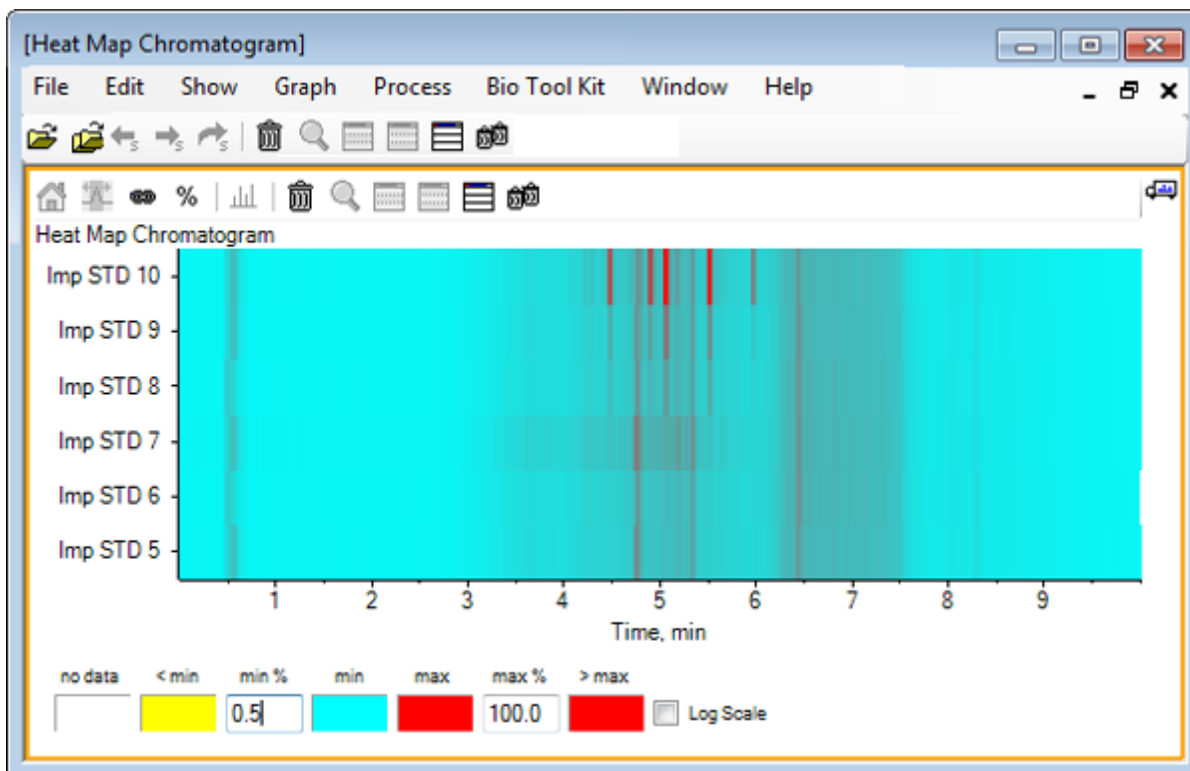
Le titre du tracé actif est affiché en caractères gras. Un clic sur l'icône à gauche de ce titre réduit les en-têtes sur une seule ligne, laissant ainsi plus de place aux informations.

8. Cliquez sur **Show > Overlaid Traces as Heat Map**, puis dans le volet obtenu, en ce qui concerne les contrôles de couleur, définissez **min%** sur **0,5** et **max%** sur **100**.

**Conseil !** Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Show Appearance Control** si les contrôles ne sont pas visibles.

9. Cliquez dans le volet du chromatogramme, puis cliquez sur l'icône **Masque tous les autres volets**.

Illustration D-66 : Chromatogramme de la carte de chaleur



Chaque échantillon est représenté par une seule bande horizontale qui affiche son TIC, avec un codage couleur qui se rapporte à l'intensité. Dans la palette de couleurs ci-dessus, le jaune représente les points où aucune donnée n'a été acquise ou bien où l'intensité est inférieure de 0,5 % à la plus grande intensité dans un échantillon. Le bleu représente une intensité de 0,5 % et le rouge représente le signal le plus intense.

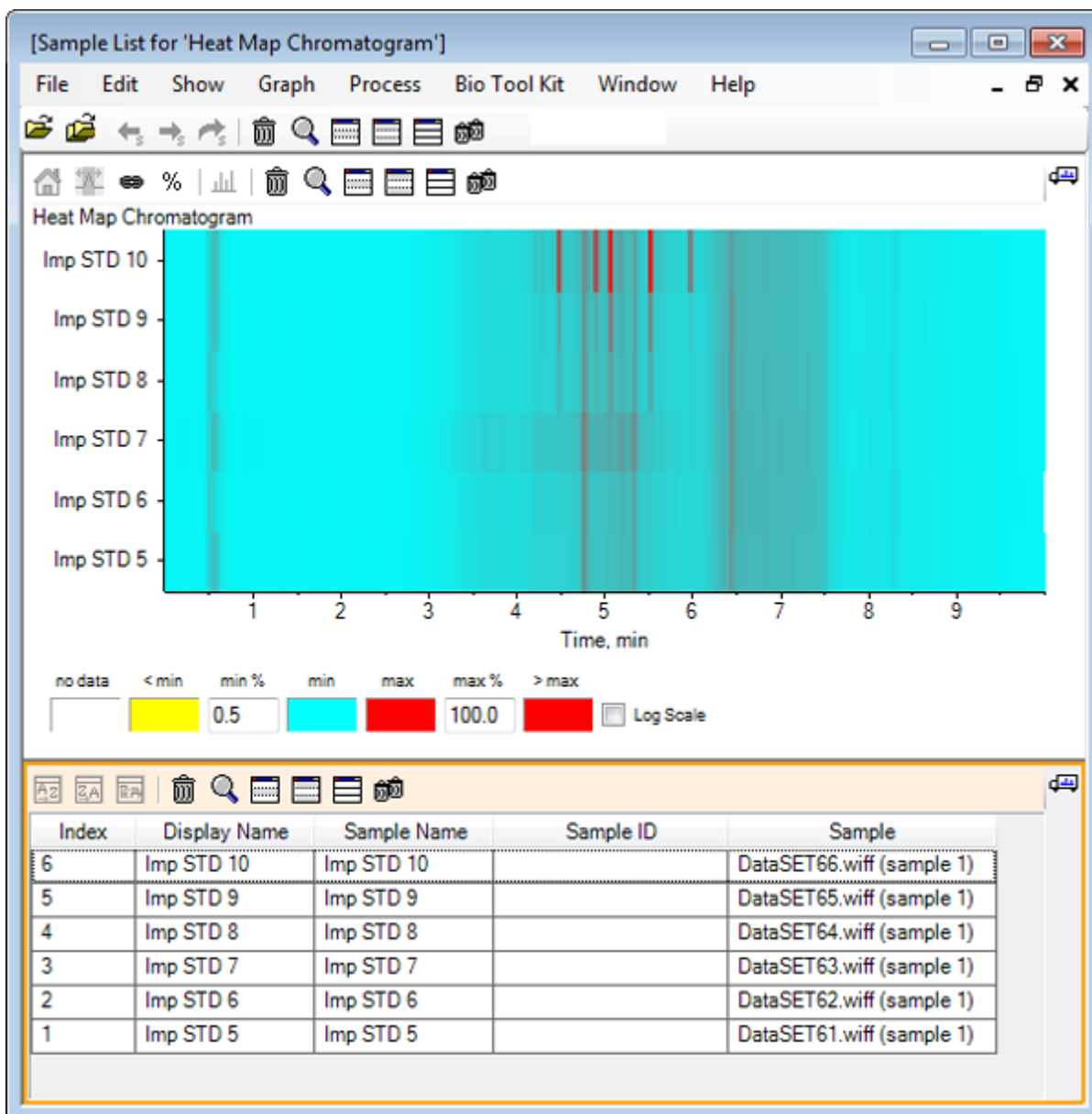
La fenêtre affiche six à sept pics (entre 4,5 et 6,5 min) et les réactions varient, à l'exception du pic à 6,5 min.

L'ordre des pics est identique à l'ordre d'acquisition des échantillons et n'est pas forcément optimal. Dans cet exemple, l'ordre est parfait.

10. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le volet, puis cliquez sur **Show Samples Table**. Initialement, le tableau des échantillons est affiché à droite de la carte de chaleur. Vous pouvez utiliser l'icône **Glisser-déposer pour réorganiser les volets** dans le coin supérieur droit du volet pour faire glisser le volet vers le bas de la carte de chaleur afin de déplacer le tableau en dessous du volet d'origine.



Illustration D-67 : Liste des échantillons pour le chromatogramme de la carte de chaleur

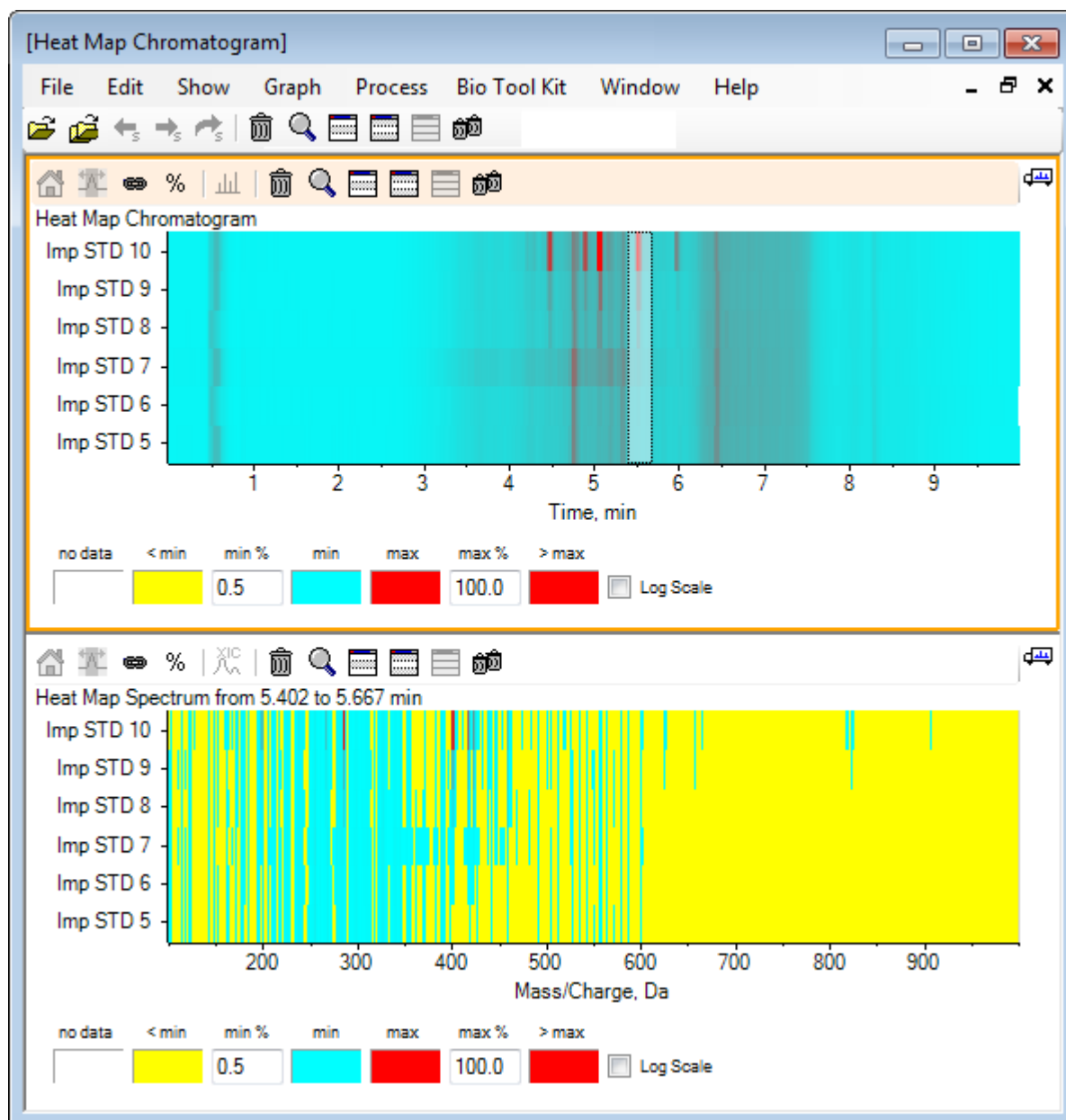


Le tableau contient des colonnes pour les différents champs textuels associés à chaque échantillon. Vous pouvez modifier la colonne **Display Name**, les autres colonnes sont en lecture seule. Toutes les colonnes peuvent être utilisées pour trier le tableau et la vue de l'échantillon.

- Effectuez une sélection dans l'échantillon Imp STD 10 autour de 5,5 min, puis double-cliquez dedans.  
Un nouveau volet Heat Map Spectrum est généré et la gamme de masses complète s'affiche sur l'axe des abscisses.



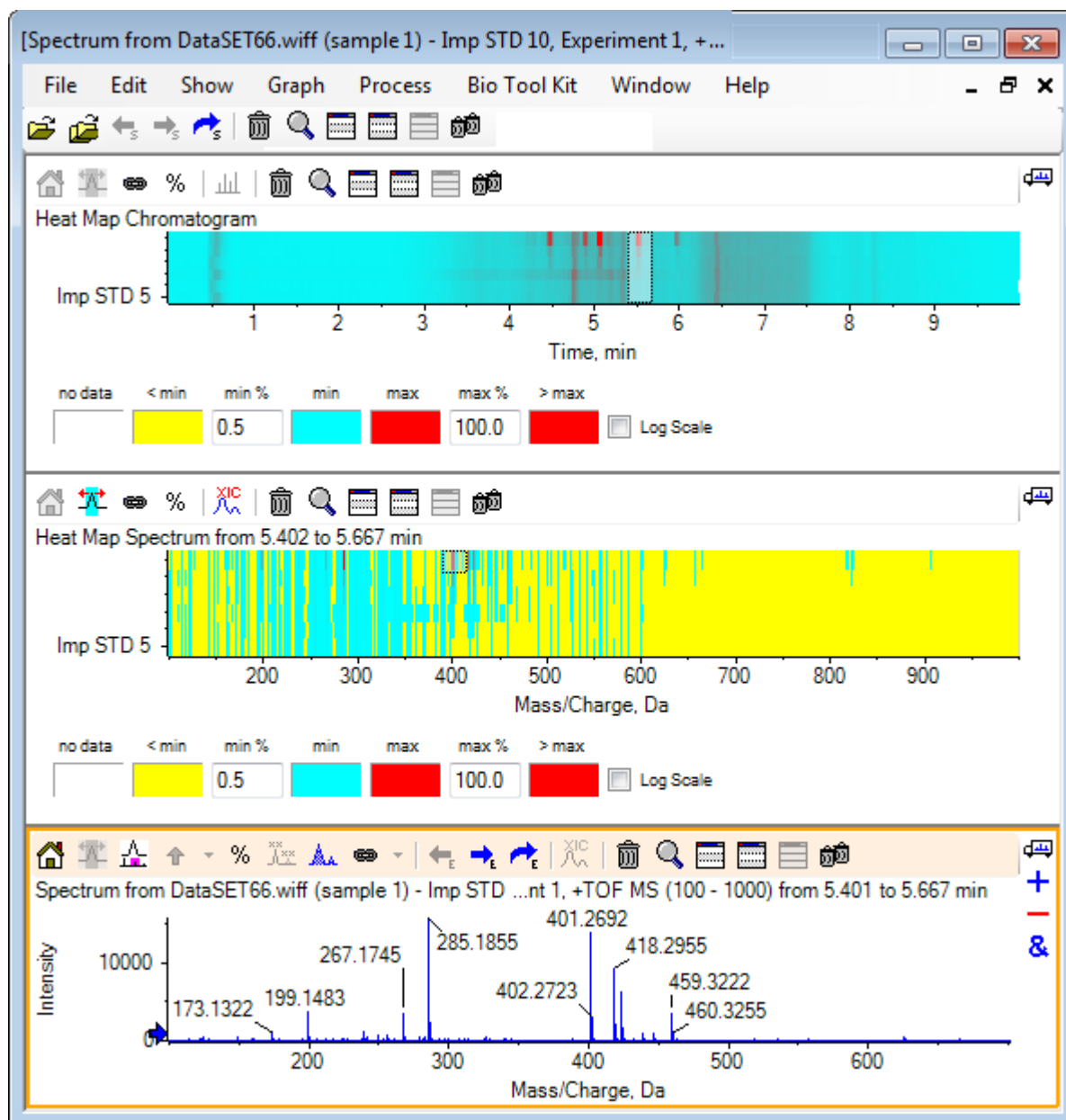
Illustration D-68 : Spectre de la carte de chaleur



Dans le spectre, vous pouvez déterminer que plusieurs masses (comprises entre une valeur  $m/z$  de 400 et une valeur  $m/z$  de 460) contribuent à la plus forte intensité dans la zone temporelle sélectionnée.

12. Sélectionnez la masse autour de Mass/Charge Da 401 pour l'échantillon Imp STD 10, puis cliquez avec le bouton droit de la souris pour sélectionner **Show Spectra for Selected Samples**. Cela génère un spectre pour l'échantillon sélectionné. Le spectre à ce repère temporel s'affiche. Reportez-vous à la [Illustration D-69](#).
13. Double-cliquez sur la masse autour de Mass/Charge 401 Da dans le spectre de la carte de chaleur pour générer un XIC de carte de chaleur.

### Illustration D-69 : Spectre



## Résumé

Dans cette section, les tâches suivantes sont abordées :

- Utilisation des différents outils d'échantillons disponibles dans le logiciel.
- Comparaison de deux échantillons avec des chromatogrammes superposés et des spectres interactifs.
- Comparaison de plusieurs échantillons avec l'affichage de cartes de chaleur.

---

## Utiliser la fonction Bio Tool Kit

Cette section illustre certaines options disponibles dans l'élément de menu **Bio Tool Kit** du logiciel.

---

**Remarque** : La fonction Bio Tool Kit MicroApp doit être activée pour accéder à cette fonctionnalité. Tant que la fonction n'est pas activée, les seules options disponibles sont Peptide Fragments, Add Manual Reconstruct Highlights et Remove Manual Reconstruct Highlights. Reportez-vous à la fonction Bio Tool Kit MicroApp du document *Notes de version*.

---

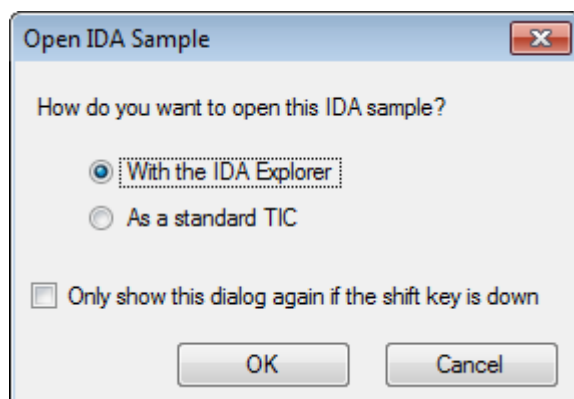
### Séquence manuelle

Utilisez cette option pour effectuer un séquençage manuel des données spectrales MS/MS à partir d'un échantillon de protéine digérée.

1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.
2. Si le dossier **Sample Data** n'est pas encore sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**.
3. Sélectionnez le fichier **RP\_digests.wiff**, puis cliquez sur **OK**.

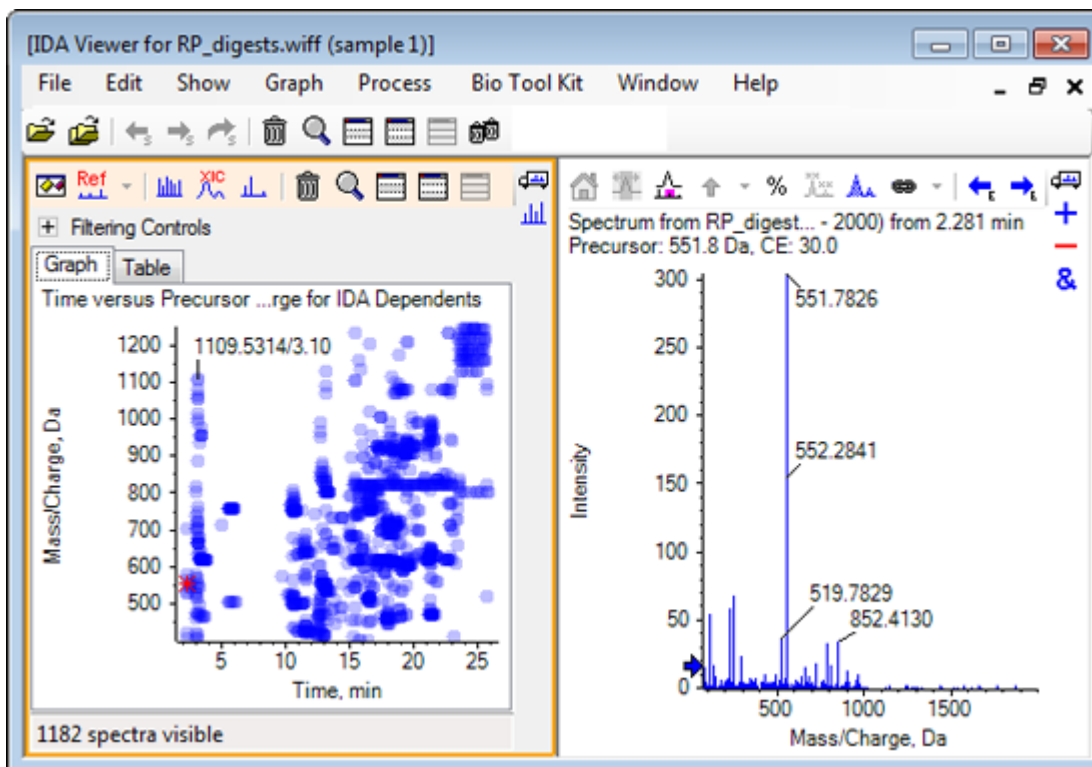
La boîte de dialogue **Open IDA Sample** s'ouvre.

#### Illustration D-70 : Boîte de dialogue Open IDA Sample



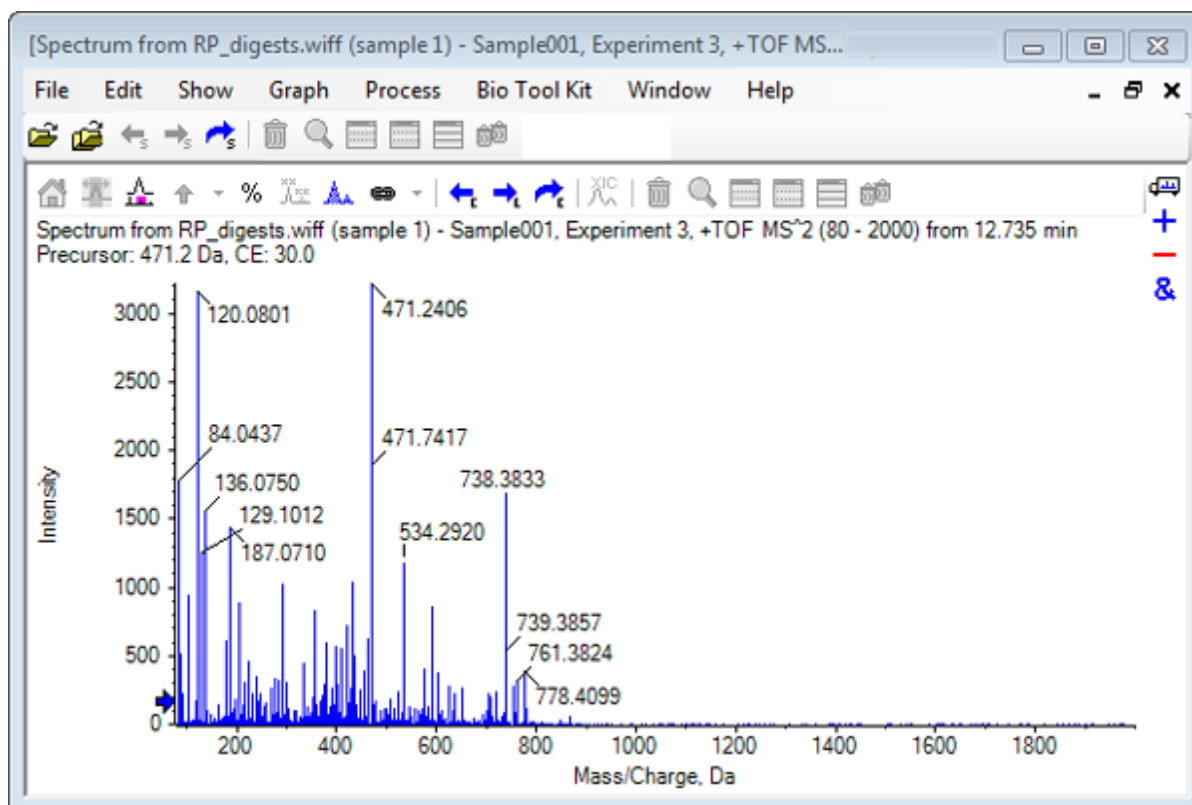
4. Assurez-vous que l'option **With the IDA Explorer** est sélectionnée, puis cliquez sur **OK**.

### Illustration D-71 : Spectre du fichier RP\_digests.wiff



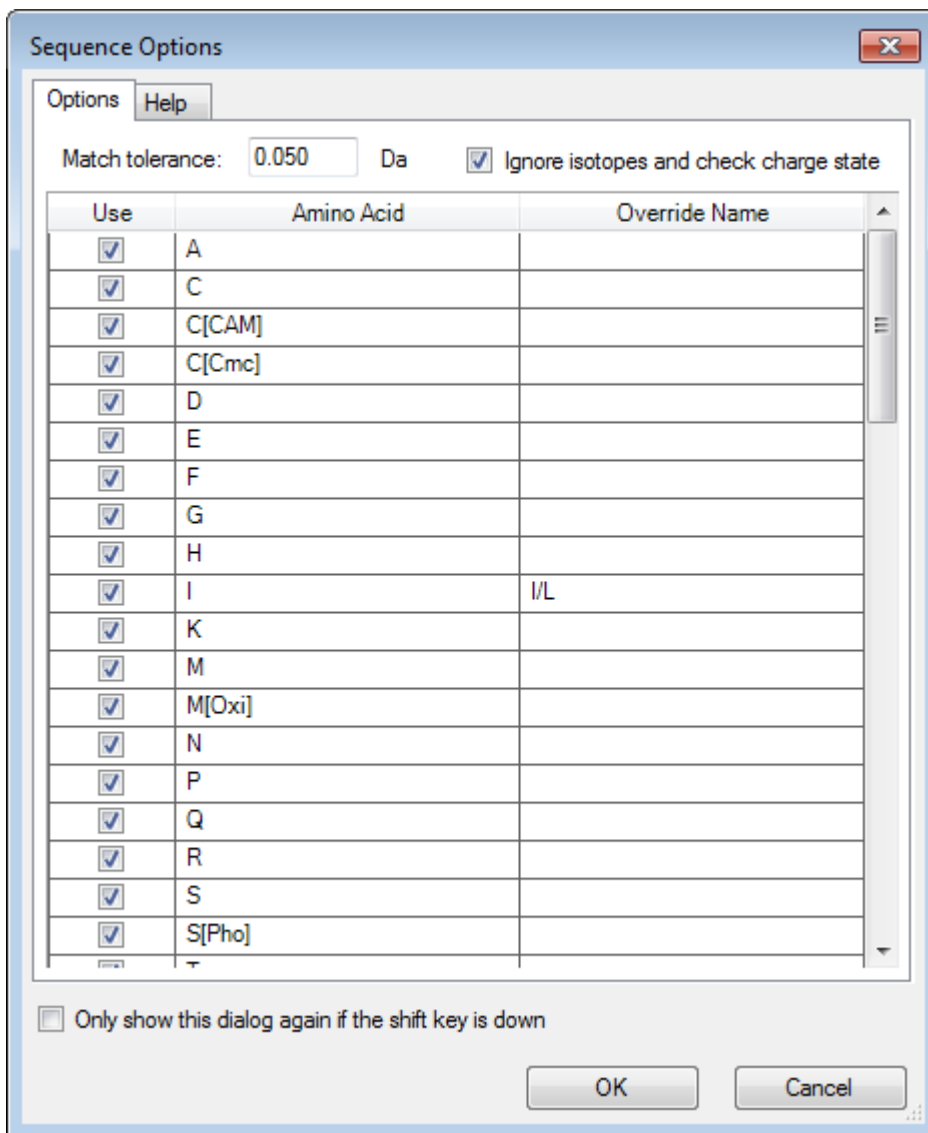
5. Cliquez sur l'onglet **Table**.
6. Sélectionnez  $m/z$  471,2398 au temps (**Time**) 12,73.
7. Avec le volet du spectre actif, cliquez sur **Graph > Duplicate Graph**.  
Un nouveau volet de spectre pour le précurseur sélectionné (471,2) s'ouvre. Vous pouvez supprimer le volet IDA Explorer et son volet de spectre associé.

## Illustration D-72 : Spectre pour le précurseur 471,2398 au temps de rétention 12,73



8. Sélectionnez le pic marqué **738,3833**.
9. Cliquez sur **Bio Tool Kit > Manual Sequence**.  
La boîte de dialogue **Sequence Options** s'ouvre.

Illustration D-73 : Boîte de dialogue Sequence Options

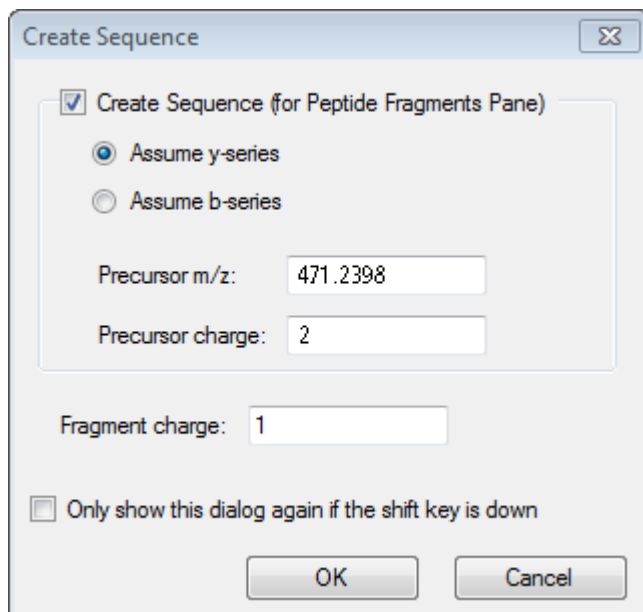


---

**Remarque :** Si vous sélectionnez la case Ignore isotopes and check charge state, les isotopes et les pics dont l'état de charge est incorrect sont ignorés par le logiciel au moment de proposer l'acide aminé suivant.

---

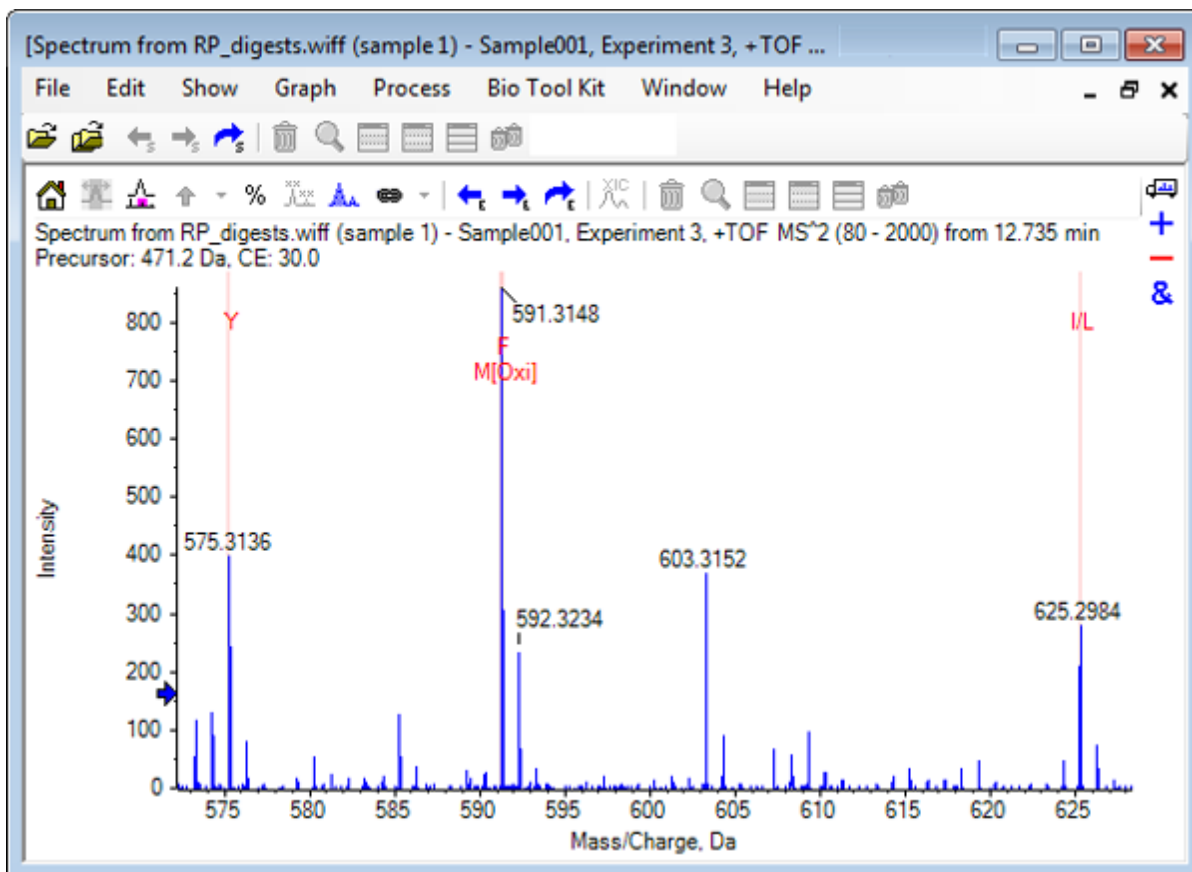
10. Cliquez sur **OK**.  
La boîte de dialogue **Create Sequence** s'ouvre.

**Illustration D-74 : Boîte de dialogue Create Sequence**

**Remarque :** Cette boîte de dialogue vous permet de modifier les hypothèses retenues pour les ions de la série y- et b- et l'état de charge après le séquençage manuel du fichier, et de trouver l'hypothèse qui correspond le mieux aux données.

11. Assurez-vous que la case **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** est cochée.
12. Saisissez **2** dans le champ **Precursor charge**.
13. Saisissez la valeur de charge du pic sélectionné à suivre dans l'arborescence de la séquence manuelle dans le champ **Fragment charge**.
14. Cliquez sur **OK**.  
Le logiciel est actualisé et affiche un volet de spectre mis à jour avec des lignes verticales rouges indiquant la première série d'acides aminés acquis ou perdus dans les données spectrales.

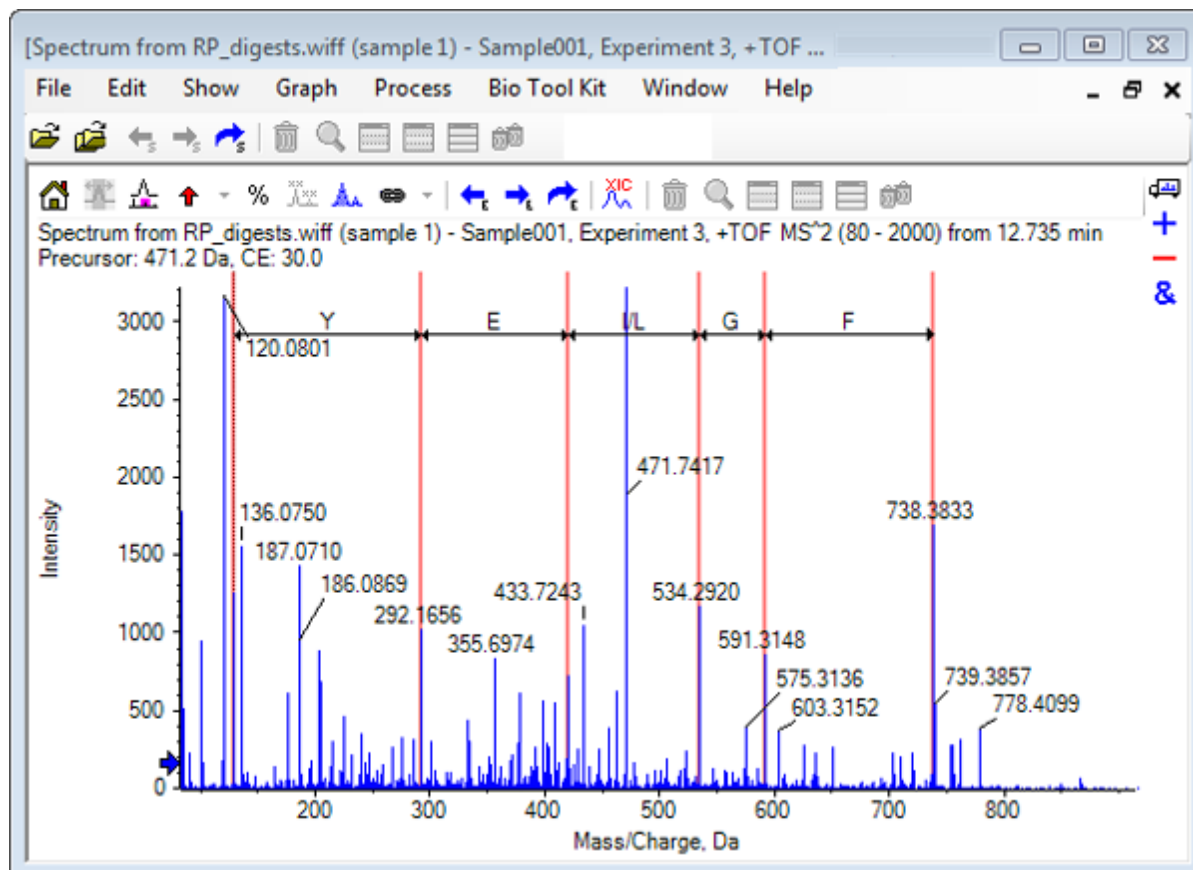
### Illustration D-75 : Spectre séquencé manuellement - Possibilités initiales



15. Double-cliquez sur la légende de la ligne verticale rouge pour un séquençage ultérieur. Le logiciel est actualisé et affiche la prochaine série d'acides aminés dans les données spectrales.
16. Répétez l'étape 15 jusqu'à ce que tous les acides aminés possibles aient été présentés.



### Illustration D-76 : Spectre séquencé manuellement



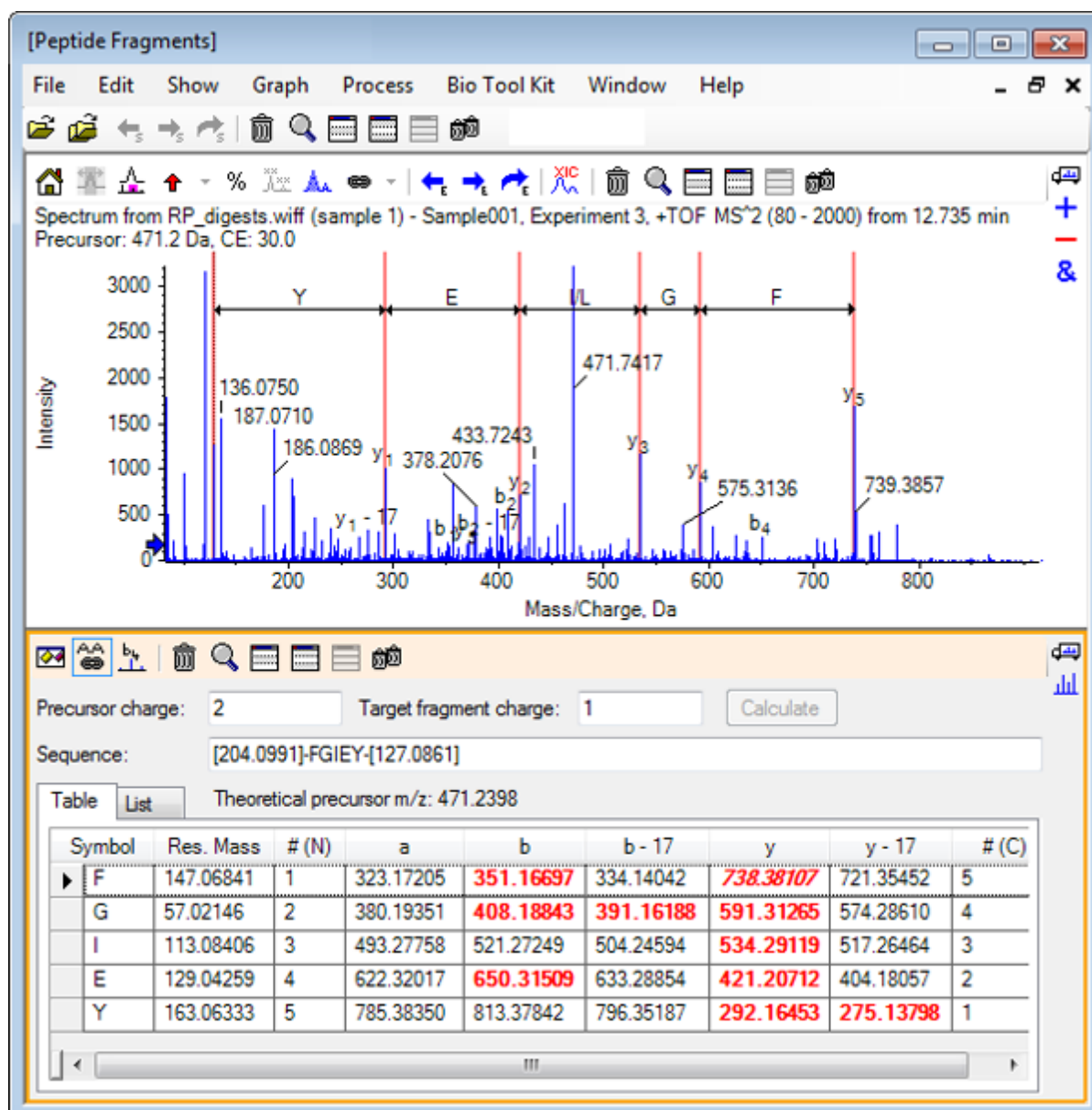
**Remarque :** dans la [Illustration D-76](#), les légendes ont été sélectionnées dans l'ordre suivant : **F > G > I/L > E > Y**.

**Conseil !** Si le logiciel propose plusieurs possibilités et que vous souhaitez suivre une section différente de celle proposée initialement, revenez à la vue initiale du graphique et répétez cette procédure pour sélectionner un autre marqueur d'acide aminé correspondant.

## Séquençage manuel associé aux fragments peptidiques

1. Cliquez sur **Bio Tool Kit > Peptide Fragments**.  
Le volet Peptide Fragments associé au spectre séquencé manuellement s'ouvre.

**Illustration D-77 : Volet Peptide Fragments associé au spectre séquencé manuellement**



**Remarque :** Les acides aminés qui correspondent aux données expérimentales sont indiqués en caractères gras et en rouge dans les colonnes de l'onglet Table. Les acides aminés qui correspondent aux données expérimentales, mais qui ont une charge de fragment cible différente sont indiqués en italique et en rouge dans les colonnes de l'onglet Table.

2. Cliquez sur l'onglet **List**.
3. Cliquez sur **Show > Mass Calculators**.
4. Cliquez sur l'onglet **AA Property**.

## Illustration D-78 : Onglet Mass Calculators — AA Property

The screenshot shows the 'Peptide Fragments' software window. The main panel displays a mass spectrum with peaks labeled Y, E, IL, G, F and y<sub>1</sub> through y<sub>5</sub>. The x-axis is 'Mass/Charge, Da' (0-800) and the y-axis is 'Intensity' (0-3000). The precursor is 471.2 Da, CE: 30.0. The 'AA Property' calculator is active, showing the sequence [204.0991]-FGIEY-[127.0861] and a precursor charge of 2. The calculator results are as follows:

Name	Charge	Mass/Charge	Error	Se
y <sub>3</sub>   b <sub>3</sub>	1	114.09134		I
y <sub>3</sub>   b <sub>4</sub>	2	122.07061		IE
y <sub>2</sub>   b <sub>4</sub>	1	130.04987		E
y <sub>1</sub> - 17	2	138.07263		Y
y <sub>1</sub>	2	146.58590		Y
v.   b. 2	2	150.58134		GIF

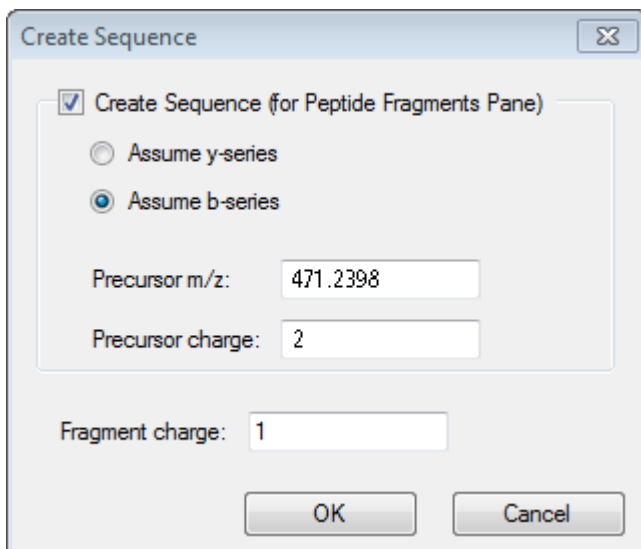
The calculator also shows the following results:

- AA sequence: [204.0991]-FGIEY-[127.0861]
- Charge state: 2
- Composition: {204.0991} C<sub>31</sub>H<sub>39</sub>N<sub>5</sub>O<sub>8</sub> {127.0861} H<sub>2</sub><sup>+</sup>
- Charged monoisotopic mass: 942.47962
- Monoisotopic m/z: 471.23981
- Charged average mass: 942.880

**Remarque :** Les calculateurs de la masse sont automatiquement associés au spectre séquencé manuellement par défaut. La séquence d'acides aminés du spectre est indiquée dans le champ **AA sequence**.

5. Avec le volet Spectrum actif, cliquez sur **Bio Tool Kit > Set Sequence Creation Parameters**.  
La boîte de dialogue **Create Sequence** s'ouvre.

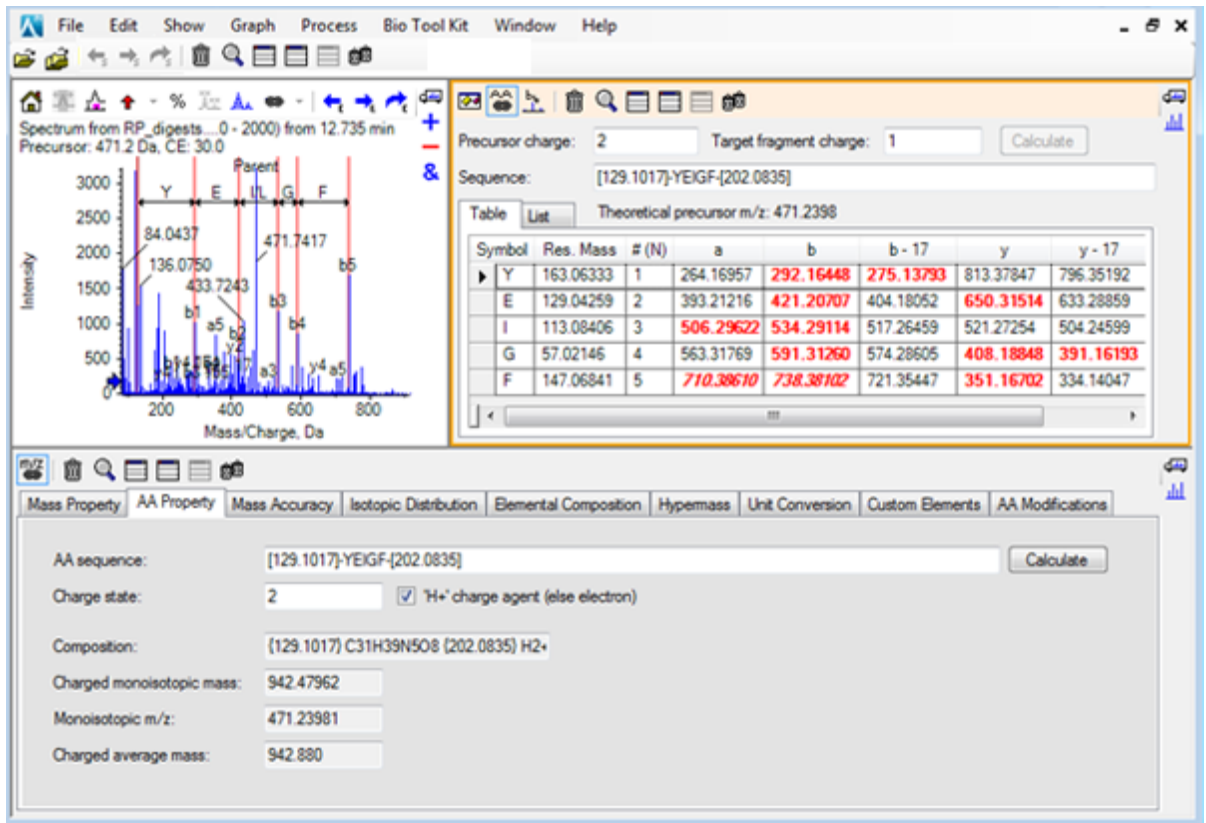
### Illustration D-79 : Boîte de dialogue Create Sequence



6. Renseignez la boîte de dialogue **Create Sequence** comme suit :
  - Assurez-vous que la case **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** est cochée.
  - Sélectionnez l'option **Assume b-series**.
  - Saisissez **471.2398** dans le champ **Precursor m/z**.
  - Saisissez **2** dans le champ **Precursor charge**.
  - Saisissez **1** dans le champ **Fragment charge**.
7. Cliquez sur **OK**.

Le volet Peptide Fragments et le volet Mass Calculators sont actualisés selon les données de séquences mises à jour.
8. Cliquez sur l'onglet **Table** dans le volet **Peptide Fragments**.

### Illustration D-80 : Volet Peptide Fragments associé au spectre séquencé manuellement actualisé



9. Avec le volet Spectrum actif, cliquez sur **Bio Tool Kit > Clear Manual Sequencing**. Tous les marquages de la séquence manuelle sont supprimés.

## Ajouter et supprimer des points forts de la reconstitution manuelle

Utilisez l'option **Add Manual Reconstruct Highlights** pour ajouter des marqueurs indiquant les positions théoriques  $m/z$  d'une masse donnée à un spectre. Cette fonction permet de confirmer si, oui ou non, des pics spécifiques d'un spectre correspondent au même composant lorsque les spectres incluent des composants à charge multiple. Utilisez l'option **Remove Manual Reconstruct Highlights** pour supprimer les marqueurs.

**Conseil !** Faites glisser la ligne verticale du marqueur vers une nouvelle valeur  $m/z$  pour déplacer le marqueur vers un nouvel emplacement.

**Conseil !** Cliquez sur la ligne verticale du marqueur ou sur le marqueur de l'état de charge correspondant pour activer le marqueur. Le marqueur actif indique l'emplacement  $m/z$ .

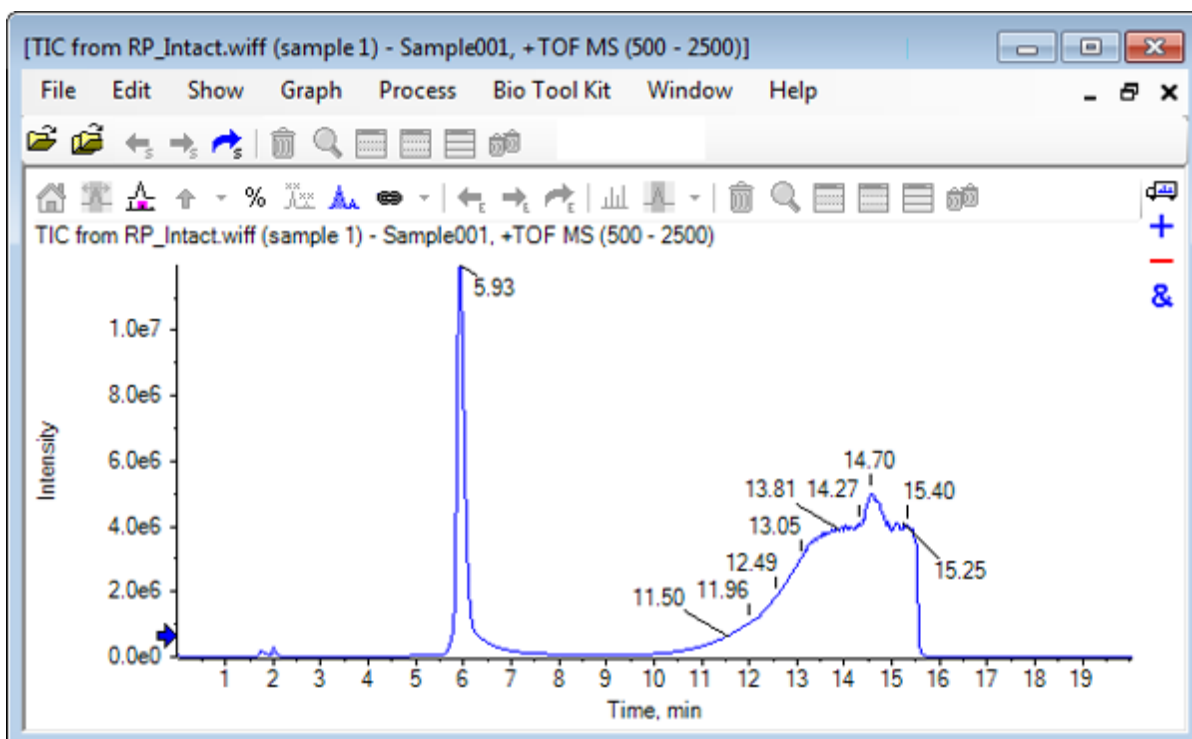
1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue Select Sample s'ouvre.

## Tutoriel pour Explorer

---

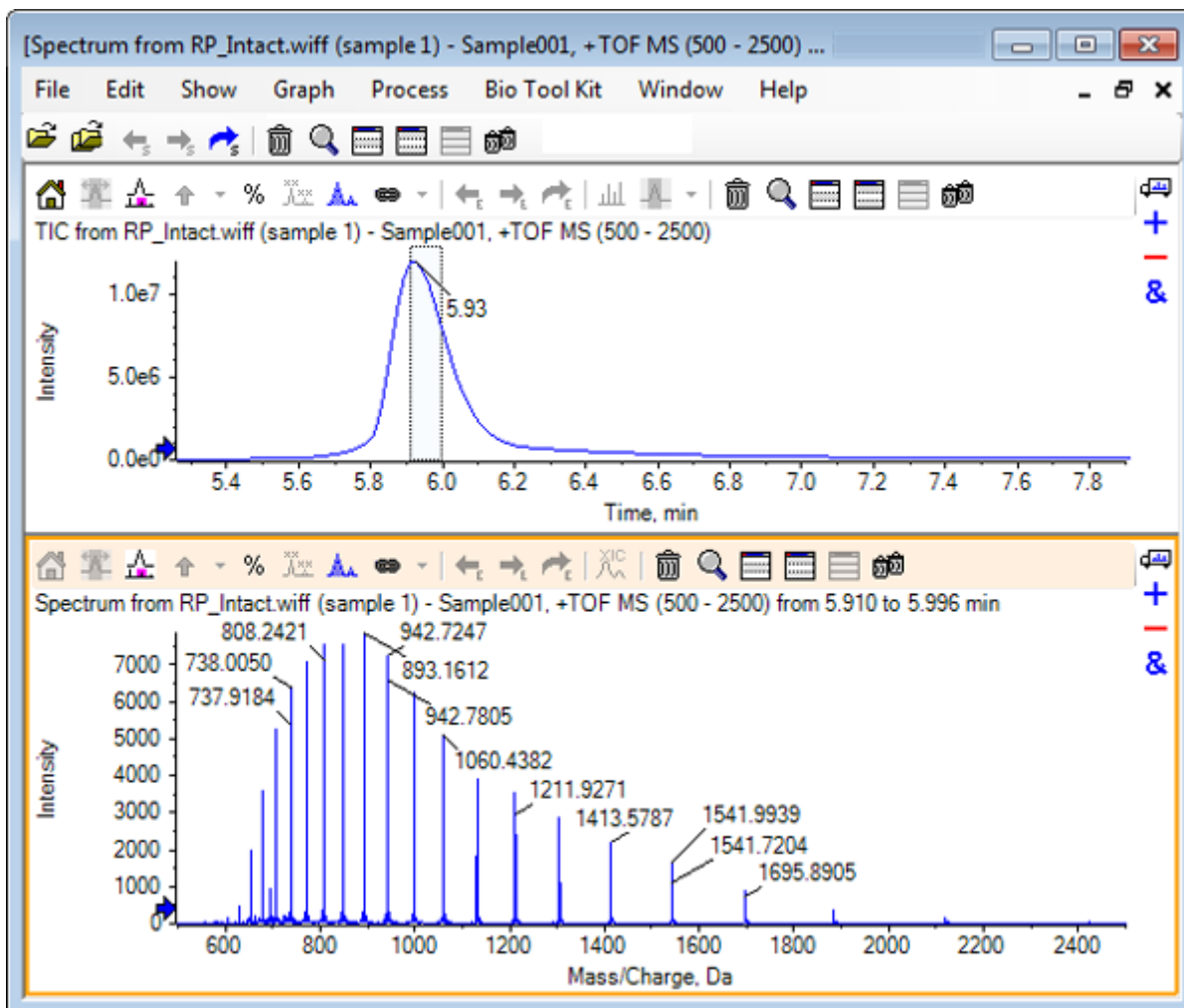
2. Si le dossier **Sample Data** n'est pas encore sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**.
3. Sélectionnez le fichier **RP\_Intact.wiff**, puis cliquez sur **OK**.

### Illustration D-81 : Fichier TIC from RP\_Intact.wiff



4. Créez un spectre moyen à l'aide de la zone supérieure (5,91 à 6,00 min) du pic de myoglobine.

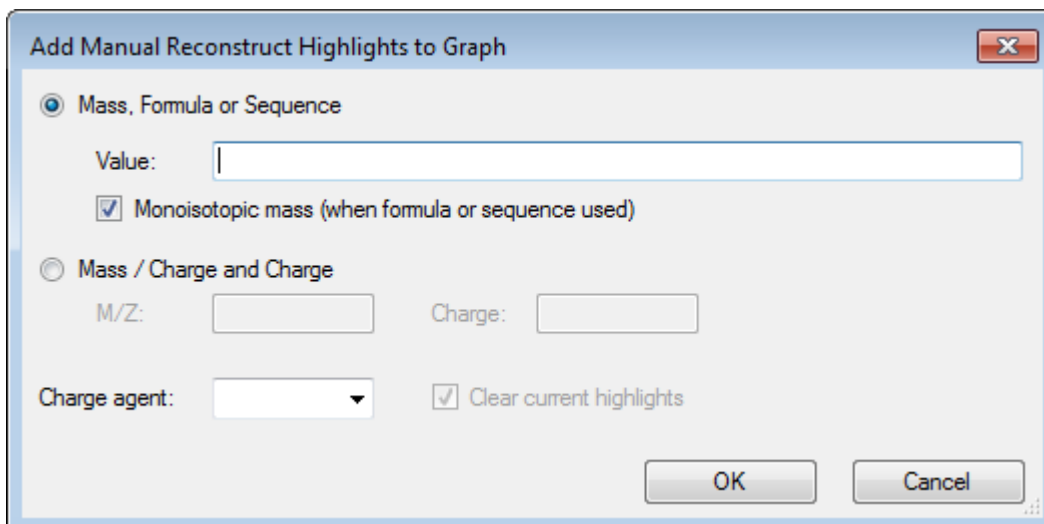
## Illustration D-82 : Spectre moyen



5. Lorsque le volet du spectre est actif, cliquez sur **Bio Tool Kit > Add Manual Reconstruct Highlights**.  
La boîte de dialogue **Add Manual Reconstruct Highlights to Graph** s'ouvre.

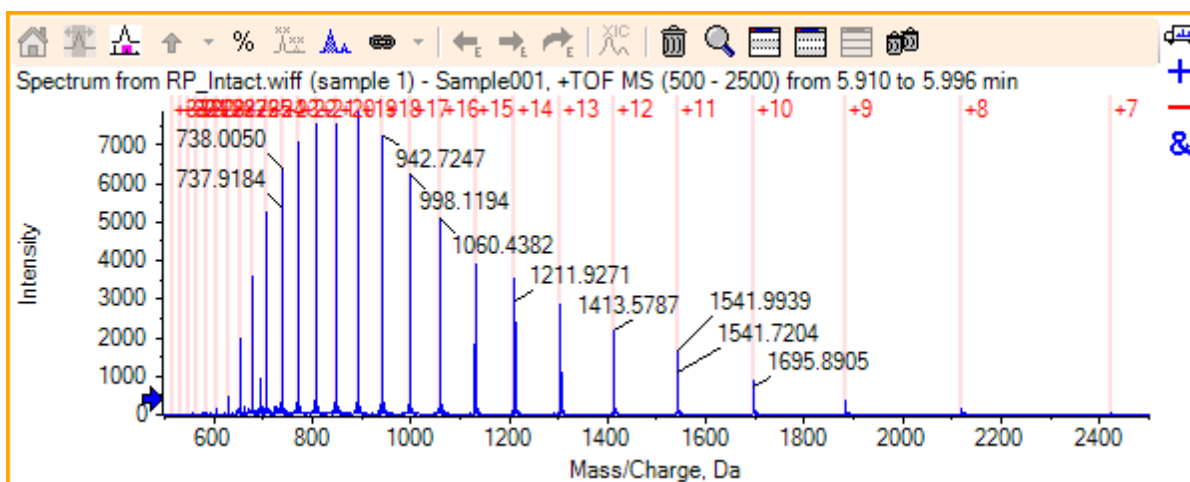


### Illustration D-83 : Add Manual Reconstruct Highlights to Graph



6. Saisissez **16950** dans le champ **Value**.
7. Sélectionnez **H+** comme **Charge agent**, puis cliquez sur **OK**.  
Le graphique est actualisé et contient les points forts.

### Illustration D-84 : Spectre avec points forts ajoutés



8. Cliquez sur **Bio Tool Kit > Remove Manual Reconstruct Highlights** pour supprimer les marqueurs.  
Le graphique est actualisé et ne contient plus les points forts.

## Option Digest Protein




Utilisez cette option pour obtenir des informations sur les séquences peptidiques théoriques qui résultent d'un clivage enzymatique défini par l'utilisateur d'une protéine spécifiée.



## Barre d'outils

Utilisez les icônes dans la barre d'outils pour ajuster la vue le cas échéant.

**Tableau D-5 : Icônes de la barre d'outils**

Icône	Nom (infobulle)
	Rechercher et remplacer consécutivement
	Convertir la sélection en majuscules
	Trouver une séquence

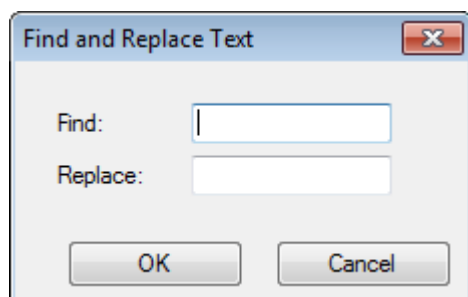
**Remarque :** Les six dernières icônes de cette barre d'outils, commençant par l'icône Supprime ce volet, sont décrites dans la section [Barre d'outils du volet générique](#).

### Rechercher et remplacer consécutivement

Utilisez cette option pour retrouver un texte existant dans le champ **Sequence** et remplacez-le par le nouveau texte.

1. Cliquez sur l'icône **Rechercher et remplacer consécutivement**.  
La boîte de dialogue **Find and Replace Text** s'ouvre.

**Illustration D-85 : Boîte de dialogue Find and Replace Text**



2. Saisissez les informations à remplacer dans le champ **Find**.
3. Saisissez les informations appropriées dans le champ **Replace**.
4. Cliquez sur **OK**.  
Le logiciel remplace le texte existant par le nouveau texte que vous avez spécifié.

### Convertir la sélection en majuscules

Utilisez cette option pour convertir le texte saisi en minuscules dans le champ **Sequence** en majuscules.

1. Sélectionnez le texte approprié.
2. Cliquez sur l'icône **Convertir la sélection en majuscules**.  
Le logiciel remplace le texte en minuscules par le même texte en majuscules.

## Tutoriel pour Explorer

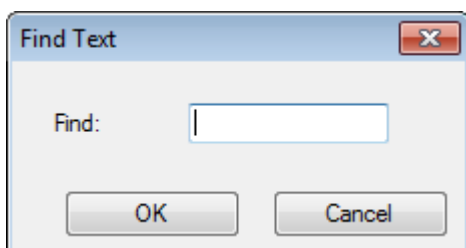
---

### Trouver une séquence

Utilisez cette option pour rechercher du texte dans le champ **Sequence**.

1. Cliquez sur l'icône **Trouver une séquence**.  
La boîte de dialogue **Find Sequence** s'ouvre.

**Illustration D-86 : Boîte de dialogue Find Sequence**

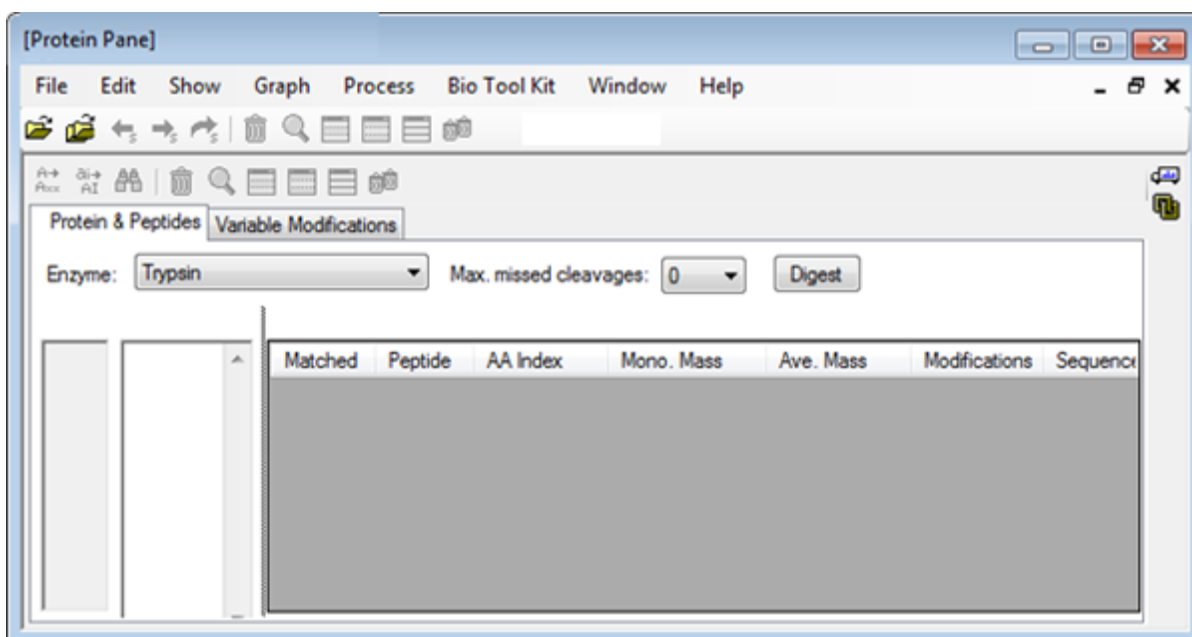


2. Saisissez les informations appropriées dans le champ **Find**.
3. Cliquez sur **OK**.  
Le logiciel met en surbrillance le texte correspondant.

### Digestion théorique des protéines

1. Cliquez sur **Bio Tool Kit > Digest Protein**.  
Le **Protein Pane** s'ouvre.

**Illustration D-87 : Protein Pane - Onglet Protein & Peptides**



2. Saisissez une séquence de protéines ou de peptides dans le champ prévu à cet effet.

---

**Remarque :** Pour ce tutoriel, GLSDGEWQQV LNVWGKVEAD IAGHGQEVLI  
RLFTGHPETL EKFDKFKHLK TEAEMKASED LKKHGTVVLT ALGGILKKKG  
HHEAELKPLA QSHATKHKIP IKYLEFISDA IIHVLHSKHP GDFGADAQGA  
MTKALELFRN DIAAKYKELG FQG (séquence de myoglobines) a été utilisé.

---

3. Sélectionnez une **enzyme**.

---

**Remarque :** Pour ce tutoriel, Trypsin a été sélectionné.

---

4. Sélectionnez une valeur pour **Max. missed cleavages**.

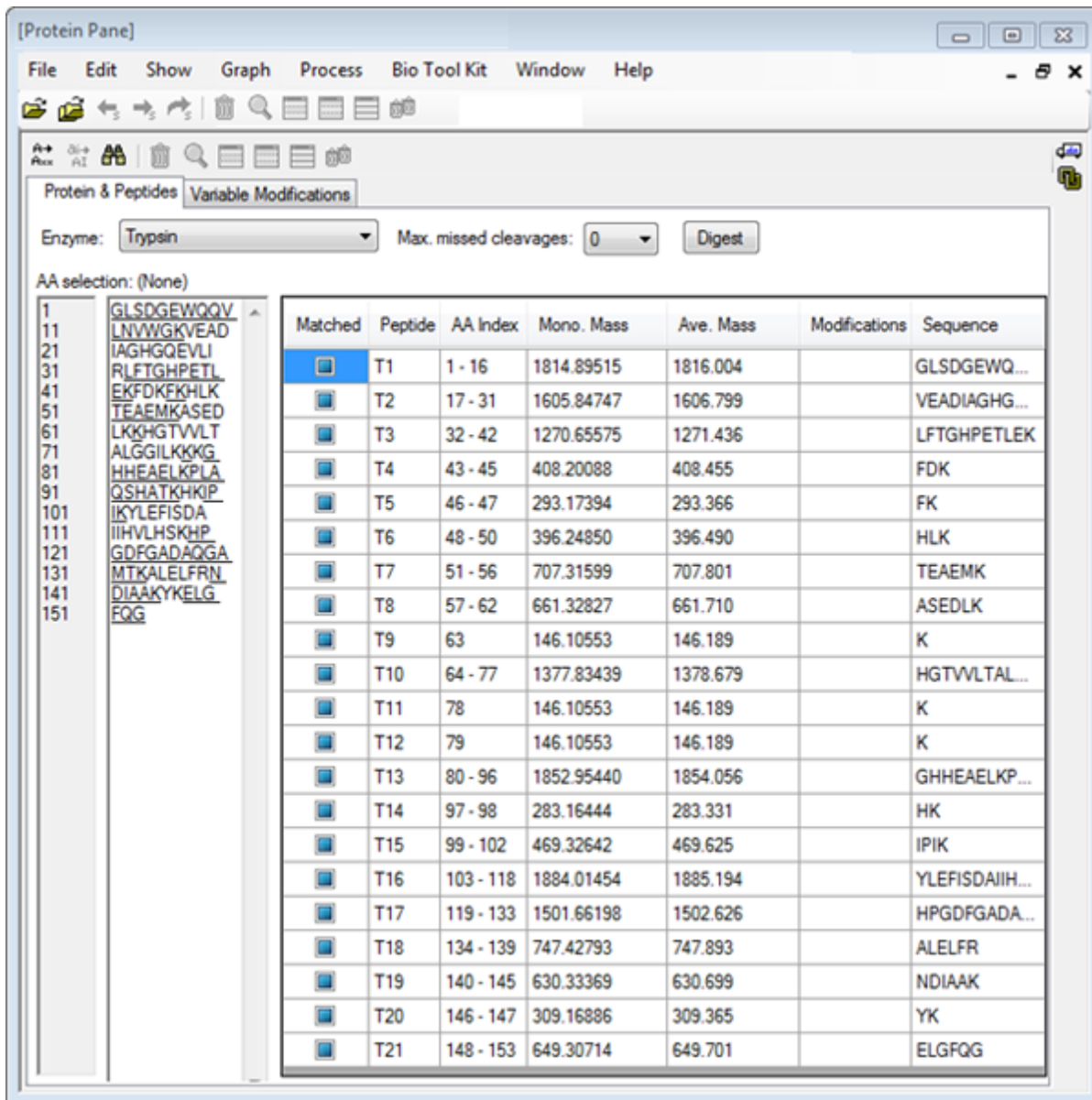
---

**Remarque :** Pour ce tutoriel, 0 a été sélectionné.

---

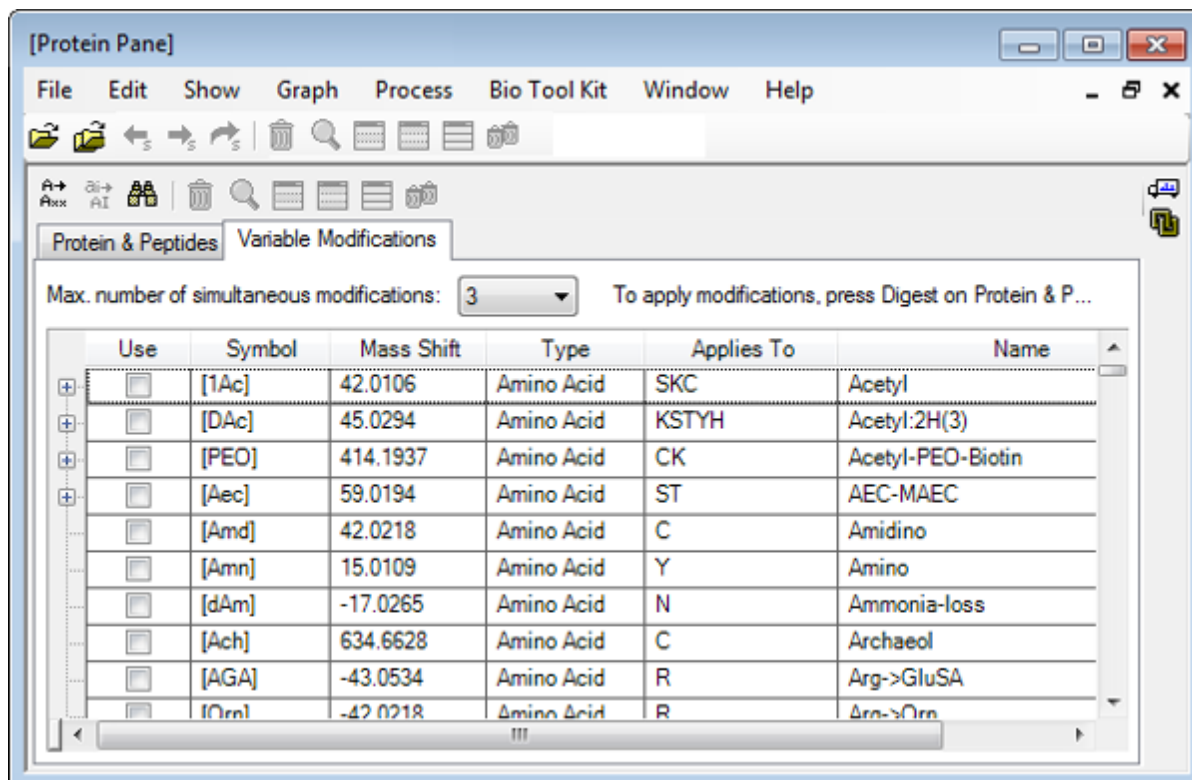
5. Cliquez sur **Digest**.  
Le logiciel renseigne le tableau avec des informations théoriques relatives aux peptides digérés et à leurs séquences.

Illustration D-88 : Protein Pane renseigné avec des informations théoriques



6. Cliquez sur l'onglet **Variable Modifications**.

## Illustration D-89 : Protein Pane - Onglet Variable Modifications



7. Sélectionnez une valeur pour **Max. number of simultaneous modifications**.

---

**Remarque :** Pour ce tutoriel, le chiffre 3 a été sélectionné.

---

8. Sélectionnez la case dans la colonne **Use** pour les modifications appropriées.

---

**Conseil !** Si une icône s'affiche à gauche de la case à cocher, vous pouvez sélectionner la liste complète des acides aminés ou tout simplement ceux qui sont applicables.

---

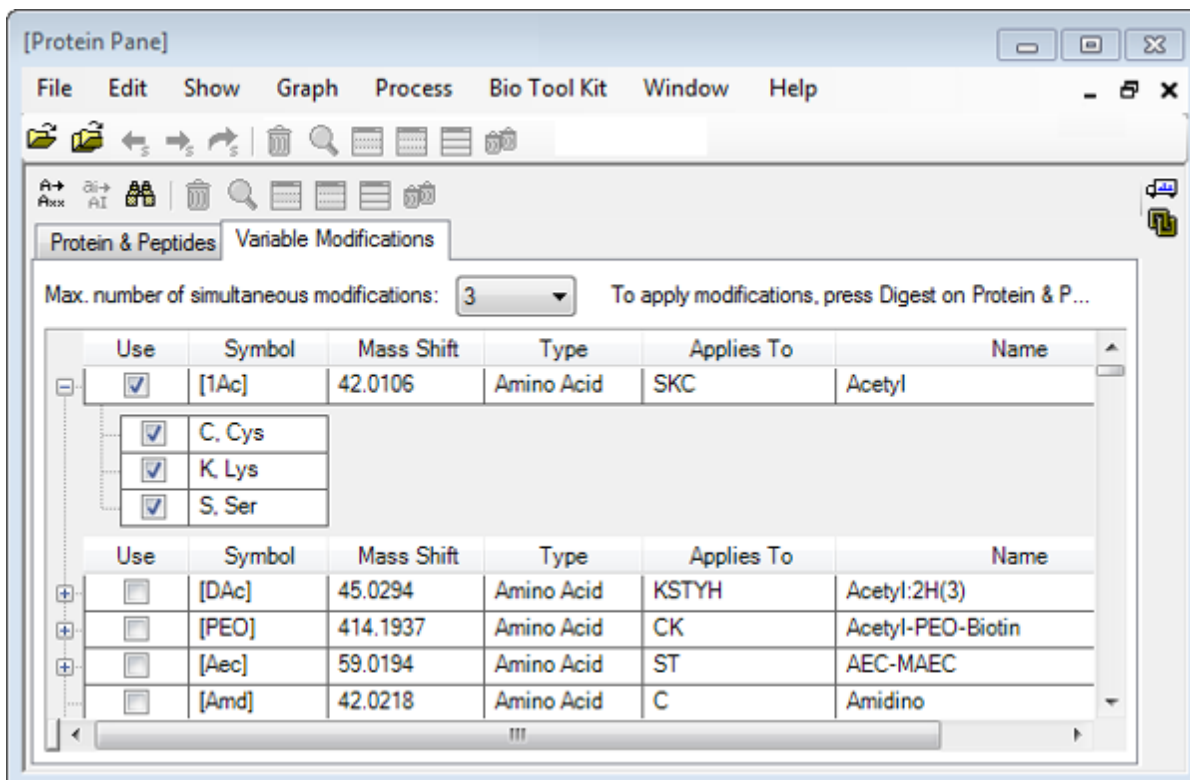


---

**Remarque :** Pour ce tutoriel, la case à cocher relative à [1Ac] a été sélectionnée.

---

### Illustration D-90 : Exemple de modifications sélectionnées



9. Cliquez sur l'onglet **Protein & Peptides**.
10. Cliquez sur **Digest**.  
Les résultats du tableau sont modifiés pour refléter les sélections que vous avez effectuées.

## Illustration D-91 : Protein Pane renseigné avec des informations modifiées

The screenshot shows the Protein Pane window with the following settings: Enzyme: Trypsin, Max. missed cleavages: 0. The AA selection is (None). The peptide list is as follows:

Matched	Peptide	AA Index	Mono. Mass	Ave. Mass	Modifications	Sequence
<input checked="" type="checkbox"/>	T1	1 - 16	1814.89515	1816.004		GLSDG...
<input checked="" type="checkbox"/>	T1	1 - 16	1856.90571	1858.041	[1Ac] (2 Iso...	GLSDG...
<input checked="" type="checkbox"/>	T1	1 - 16	1898.91628	1900.078	2[1Ac]	GLS[1A...
<input checked="" type="checkbox"/>	T2	17 - 31	1605.84747	1606.799		VEADIA...
<input checked="" type="checkbox"/>	T3	32 - 42	1270.65575	1271.436		LFTGHP...
<input checked="" type="checkbox"/>	T3	32 - 42	1312.66632	1313.473	[1Ac]	LFTGHP...
<input checked="" type="checkbox"/>	T4	43 - 45	408.20088	408.455		FDK
<input checked="" type="checkbox"/>	T4	43 - 45	450.21145	450.492	[1Ac]	FDK[1Ac]
<input checked="" type="checkbox"/>	T5	46 - 47	293.17394	293.366		FK
<input checked="" type="checkbox"/>	T5	46 - 47	335.18451	335.403	[1Ac]	FK[1Ac]
<input checked="" type="checkbox"/>	T6	48 - 50	396.24850	396.490		HLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T6	48 - 50	438.25907	438.527	[1Ac]	HLK[1Ac]
<input checked="" type="checkbox"/>	T7	51 - 56	707.31599	707.801		TEAEMK
<input checked="" type="checkbox"/>	T7	51 - 56	749.32656	749.838	[1Ac]	TEAEM...
<input checked="" type="checkbox"/>	T8	57 - 62	661.32827	661.710		ASEDLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T8	57 - 62	703.33884	703.747	[1Ac] (2 Iso...	ASEDLK

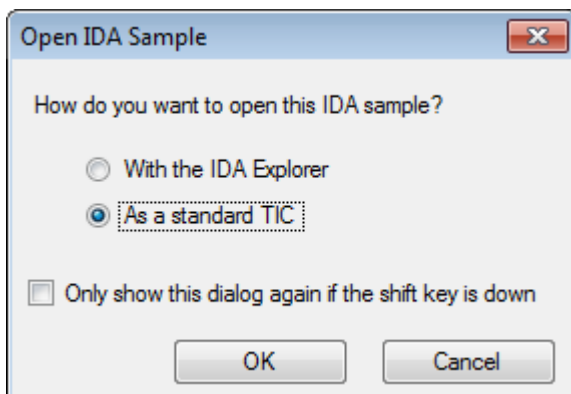
## Reconstitution peptidique LCMS

La reconstitution peptidique LCMS identifie les pics spectraux et effectue une déconvolution des pics spectraux identifiés. L'outil de reconstitution peptidique LCMS fonctionne en deux étapes. Tout d'abord, les pics sont localisés à l'aide de l'algorithme de recherche « Enhance » (Améliorer). Ensuite, l'outil recherche les groupes de pics qui forment la série d'isotopes et la série de charge, et signale la masse neutre de tous les composants trouvés.

1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.
2. Si le dossier Sample Data n'est pas déjà sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**.
3. Sélectionnez le fichier **RP\_digests.wiff**, puis cliquez sur **OK**.

La boîte de dialogue **Open IDA Sample** s'ouvre.

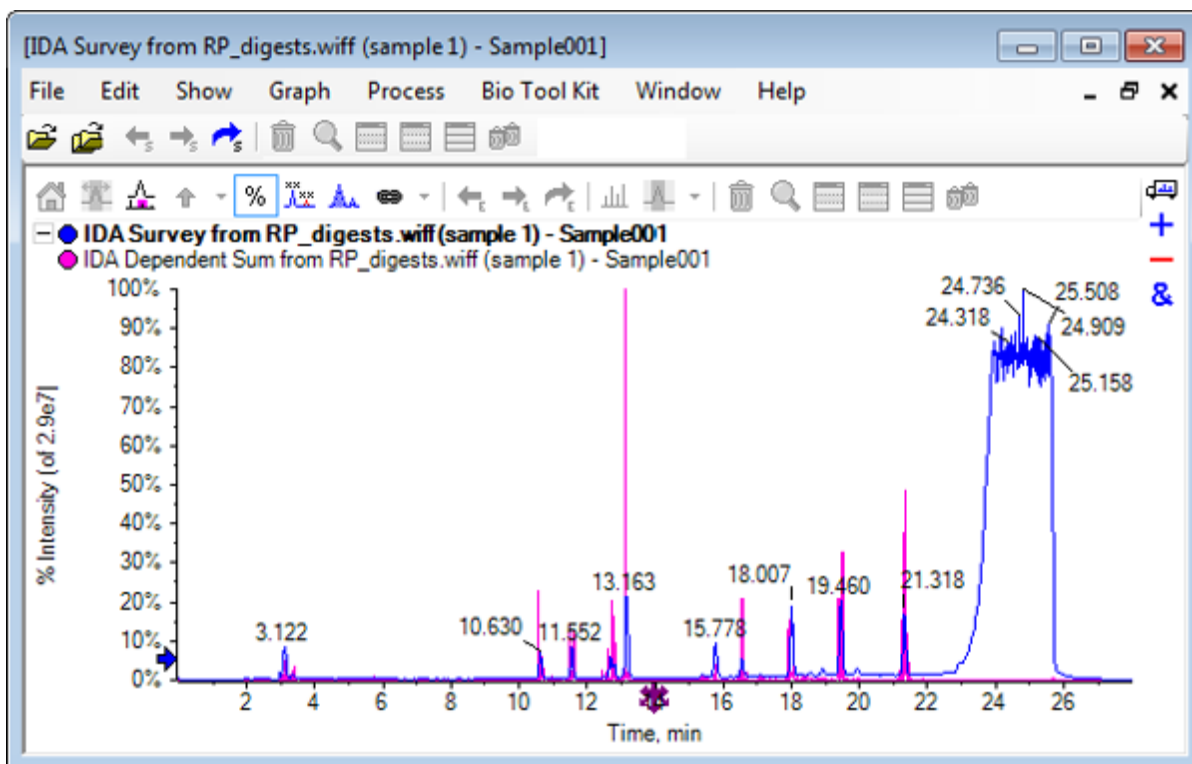
### Illustration D-92 : Boîte de dialogue Open IDA Sample



4. Assurez-vous que l'option **As a standard TIC** est sélectionnée, puis cliquez sur **OK**.

Assurez-vous que le premier tracé **IDA Survey from RP\_digests.wiff (sample 1) - Sample001** s'affiche en gras. Si nécessaire, sélectionnez ce tracé.

### Illustration D-93 : Exploration IDA du fichier RP\_digests.wiff



5. Cliquez sur **Bio Tool Kit > LCMS Peptide Reconstruct (with peak finding)**. La boîte de dialogue **LCMS Peptide Reconstruct Options** s'ouvre.



## Illustration D-94 : Boîte de dialogue LCMS Peptide Reconstruct Options

LCMS Peptide Reconstruct Options

Time Range

Minimum retention time: 0.00 min  Maximum retention time: 0.00 min

'Enhance' Peak Finding

Approximate LC peak width: sec Minimum intensity in counts: 5 counts

Perform background subtraction Chemical noise intensity multiplier: 1.5

Charge Deconvolution

Mass tolerance: 0.100 Da Maximum charge: 5

OK Cancel

6. Saisissez les valeurs suivantes dans les champs prévus à cet effet :

- **9,00** min dans le champ **Minimum retention time**
- Sélectionnez la case **Maximum retention time**, puis saisissez **16,00** dans le champ
- **6,0** s dans le champ **Approximate LC peak width**

---

**Remarque** : La largeur approximative du pic est utilisée pour déterminer le décalage pendant la soustraction du bruit de fond.

---

- **5** dans le champ **Minimum intensity in counts**
- **1,5** dans le champ **Chemical noise intensity multiplier**
- **0,100** Da dans le champ **Mass tolerance**
- **5** dans le champ **Maximum charge**

---

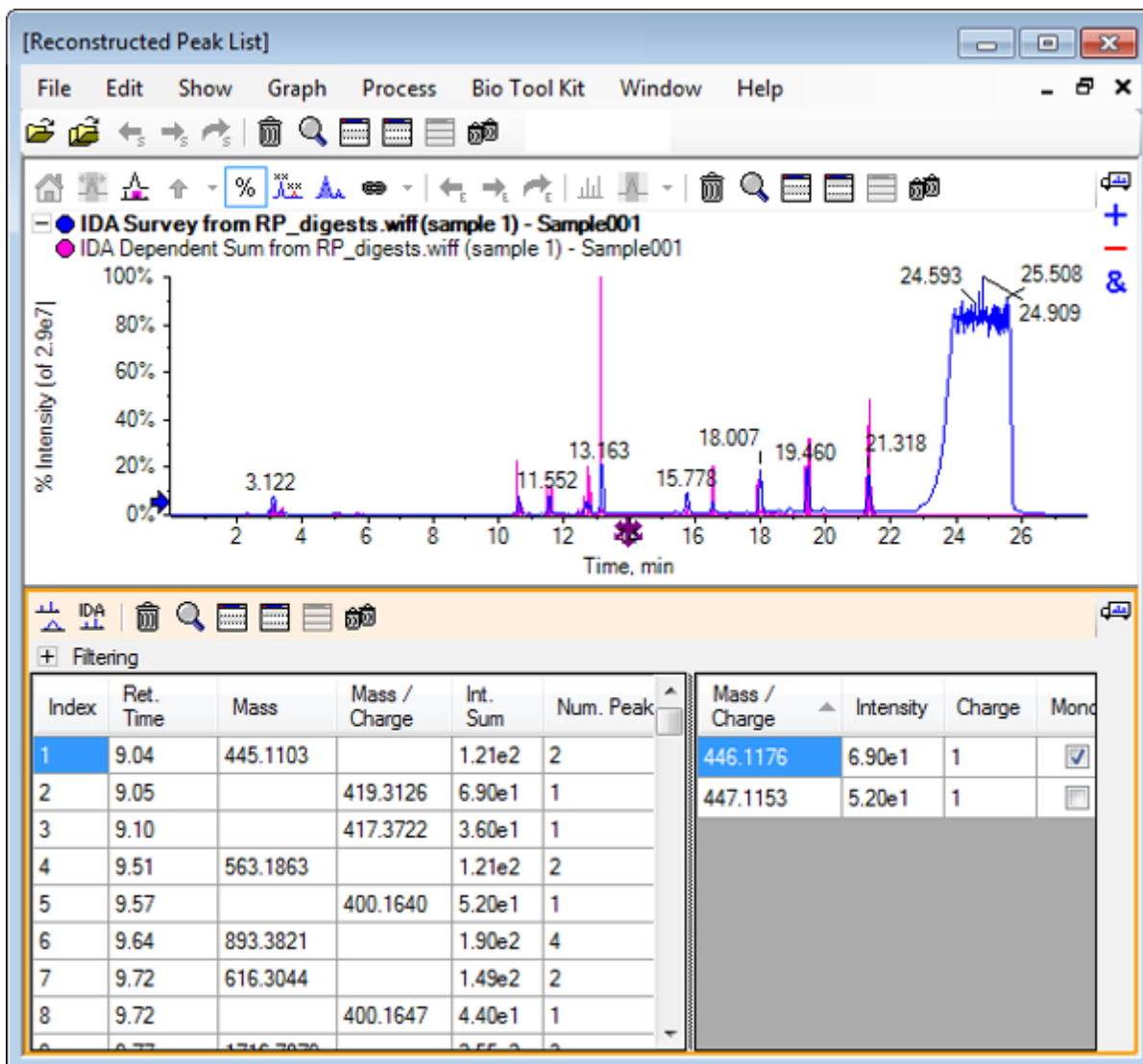
**Remarque** : La tolérance de masse dans la section Charge Deconvolution garantit que le pic reconstitué correspond à la protéine théoriquement digérée et que les différentes valeurs  $m/z$  appartenant au même peptide sont regroupées.

---

7. Cliquez sur **OK**.

Le logiciel affiche un tableau de peptides, séparés par le temps de rétention. Les informations suivantes sont fournies pour chaque peptide énuméré : **Index**, **Ret. Time**, **Mass**, **Mass / Charge**, **Int. Sum** et **Num. Peaks**.

Illustration D-95 : Liste des pics reconstitués



8. Développez **Filtering** pour afficher les options de filtrage disponibles.

Les options de filtrage disponibles comprennent : **Intensity threshold**, **Min. Num. Peaks** et **Show matched peaks only**.

## Illustration D-96 : Options de filtrage

Filtering

Intensity threshold:

Min. Num. Peaks:   Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peaks	Mass / Charge	Intensity	Charge	Mono
1	9.04	445.1103		1.21e2	2	446.1176	6.90e1	1	<input checked="" type="checkbox"/>
2	9.05		419.3126	6.90e1	1	447.1153	5.20e1	1	<input type="checkbox"/>
3	9.10		417.3722	3.60e1	1				
4	9.51	563.1863		1.21e2	2				
5	9.57		400.1640	5.20e1	1				
6	9.64	893.3821		1.90e2	4				

9. Sélectionnez un ou plusieurs filtres pour ajuster la vue si nécessaire.

**Remarque :** Dans ce tutoriel, Intensity threshold a été défini sur 2.39e4 et Min. Num. Peaks a été défini sur 4.

## Illustration D-97 : Liste filtrée des pics reconstitués

Filtering

Intensity threshold:



Min. Num. Peaks:   Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peaks	Mass / Charge	Intensity	Charge	Mono.
1	10.62	1501.6620		2.39e5	17	501.5605	2.98e4	3	<input checked="" type="checkbox"/>
2	11.55	1270.6542		2.98e5	16	501.8947	3.22e4	3	<input type="checkbox"/>
3	12.68	940.4651		1.93e5	9	502.2281	1.41e4	3	<input type="checkbox"/>
4	13.15	1605.8489		8.62e5	18	502.5619	5.46e3	3	<input type="checkbox"/>
5	15.76	563.3048		1.53e5	4	502.8962	2.39e3	3	<input type="checkbox"/>
6	15.78	747.4268		1.96e5	4	503.2294	3.95e2	3	<input type="checkbox"/>
						751.8383	3.89e4	2	<input checked="" type="checkbox"/>

## Barre d'outils

Utilisez les icônes dans la barre d'outils pour ajuster la vue le cas échéant.

Tableau D-6 : Icônes de la barre d'outils

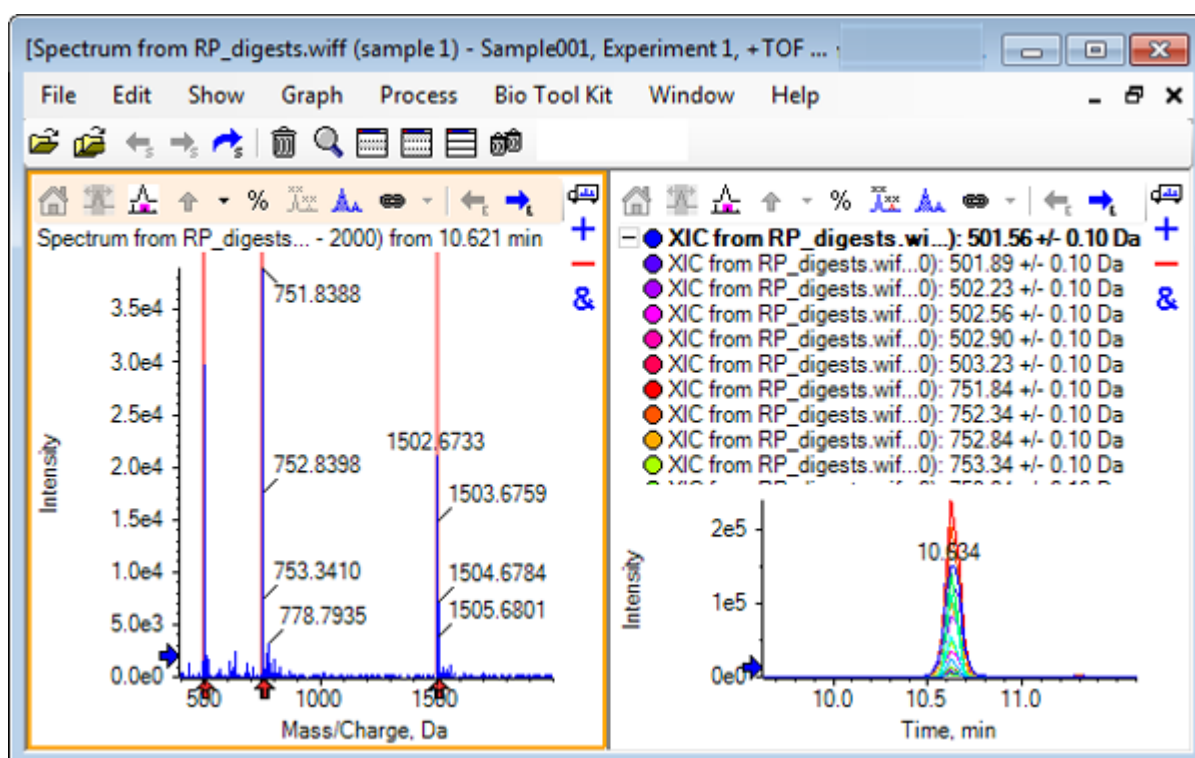
Icône	Nom (infobulle)
	Afficher le spectre et le XIC
	Afficher les spectres IDA MS/MS

**Remarque** : Les six dernières icônes de cette barre d'outils, commençant par l'icône Supprime ce volet, sont décrites dans la section [Barre d'outils du volet générique](#).

### Afficher le spectre et le XIC

Si l'icône **Afficher le spectre et le XIC** est sélectionnée, les volets du spectre et du XIC suivants s'ouvrent :

Illustration D-98 : Afficher les résultats du spectre et du XIC



Pour le spectre MS généré, une flèche s'affiche sous chaque pic ayant contribué à la masse du peptide. Le XIC de chaque pic  $m/z$  ayant contribué à la masse peptidique est représenté sous la forme de superpositions sur la droite du volet.

### Afficher les spectres IDA MS/MS

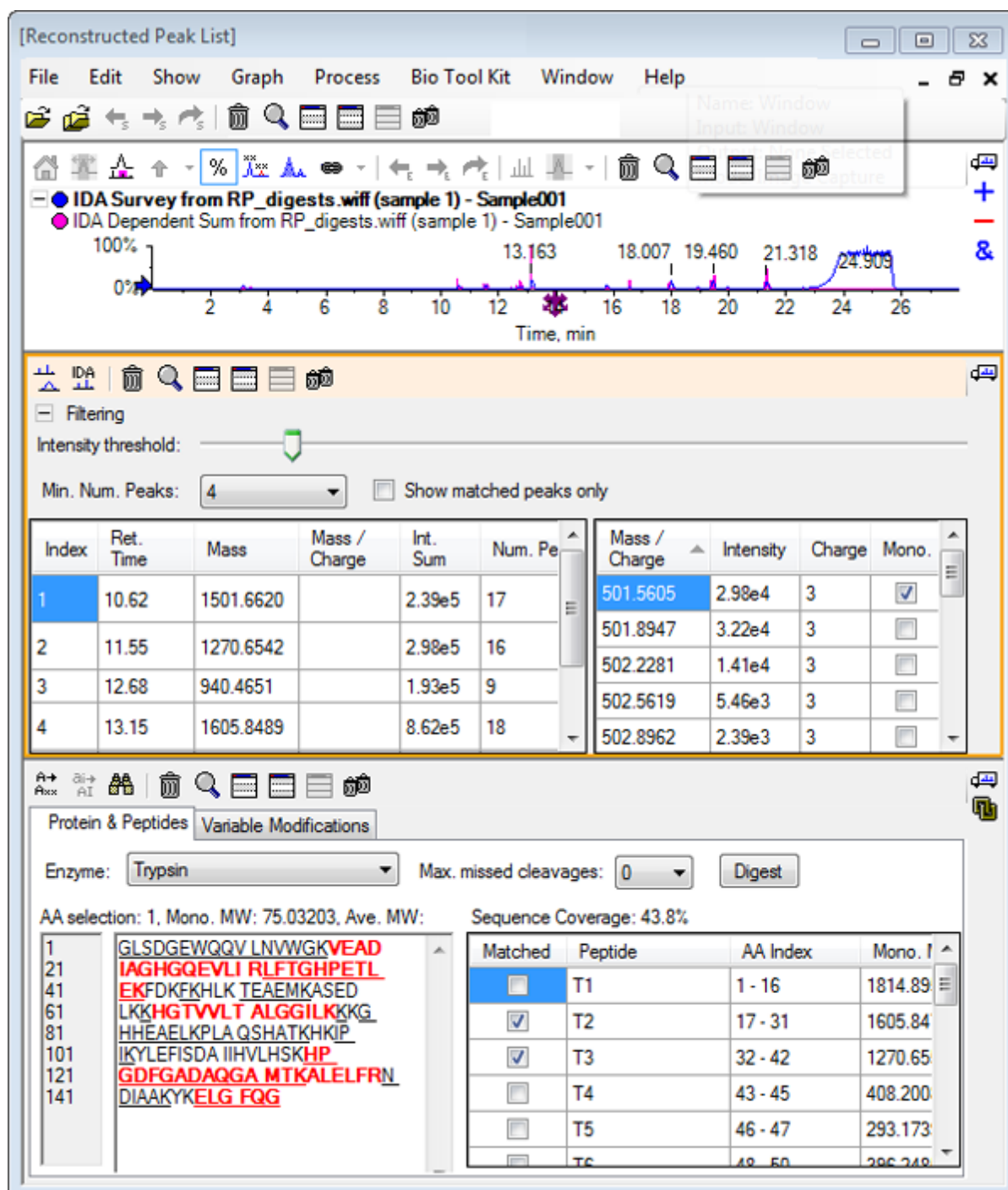
Lorsque l'icône **Afficher les spectres IDA MS/MS** est sélectionnée, le volet des spectres suivant apparaît :

## Reconstitution peptidique LCMS avec digestion de protéines

1. Cliquez sur **Bio Tool Kit > Digest Protein**.  
Le **Protein Pane** s'ouvre.
2. Faites glisser l'icône **Faire glisser vers un volet de protéine pour définir sa liste des pics** du **Protein Pane** vers le volet **Reconstructed Peak List**.

Le **Protein Pane** est actualisé et affiche les séquences peptidiques dans le Protein Pane correspondant à celles de la liste des pics reconstitués. Les fragments du **Protein Pane** affichés en gras et en rouge correspondent exactement aux fragments du volet **Reconstructed Peak List**. Les fragments affichés en caractères normaux et en rouge sont des fragments qui correspondraient aux fragments du volet **Reconstructed Peak List** si l'état de charge indiqué entre parenthèses leur avait été affecté dans la colonne **Match** du volet **Reconstructed Peak List**. Les fragments affichés en noir sont des fragments qui ne correspondent à aucun fragment dans le volet **Reconstructed Peak List**.

**Illustration D-99 : Informations théoriques sur le Protein Pane associé au volet Reconstructed Peak List**

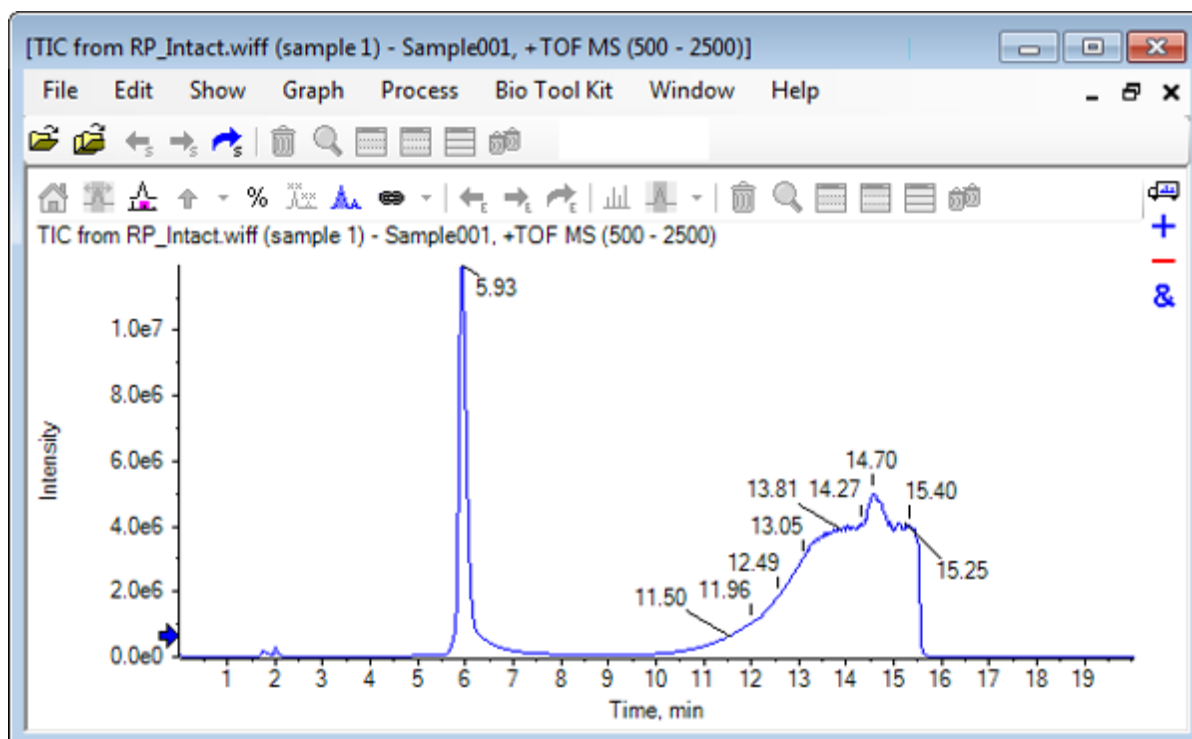


**Option Reconstruct Protein**

Utilisez cette option pour obtenir la masse moyenne (poids moléculaire) d'une protéine intacte.

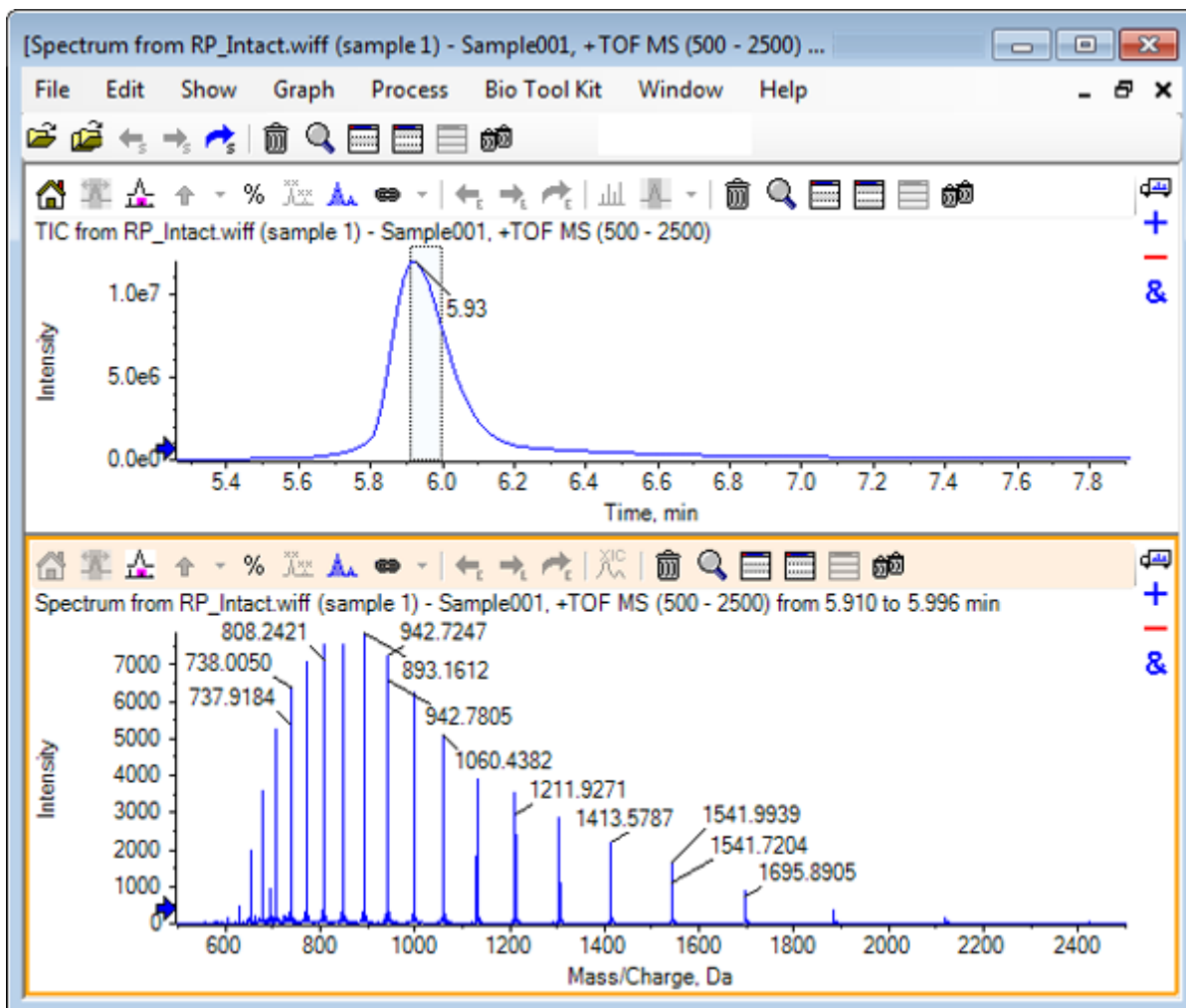
1. Cliquez sur l'icône **Ouvrir un échantillon** dans la barre d'outils principale. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.
2. Si le dossier **Sample Data** n'est pas encore sélectionné, cliquez sur **Browse** et accédez au dossier **Sample Data**.
3. Sélectionnez le fichier **RP\_Intact.wiff**, puis cliquez sur **OK**.

**Illustration D-100 : Fichier TIC from RP\_Intact.wiff**



4. Créez un spectre moyen à l'aide d'une zone du pic à 5,93 min. Reportez-vous à la [Illustration D-101](#).

Illustration D-101 : Spectre moyen



5. Avec le volet Spectrum actif, cliquez sur **Bio Tool Kit** > **Reconstruct Protein**. La boîte de dialogue **Reconstruction Options** s'ouvre.



## Illustration D-102 : Reconstruction Options

Reconstruction Options

Use limited input m/z range:

Start m/z:  Da

Stop m/z:  Da

Output mass range

Start mass:  Da

Stop mass:  Da

Step mass:  Da

Parameters

Input spectrum isotope resolution:  ▼

Charge agent:  ▼

OK Cancel

6. Saisissez les valeurs appropriées pour les options suivantes :
  - **Start mass** : 15000 Da (15 000 Da)
  - **Stop mass** : 18000 Da (18 000 Da)
  - **Step mass** : 1.0 Da (1,0 Da)
7. Sélectionnez une valeur appropriée pour le champ **Input spectrum isotope resolution** : Moderate (10000).

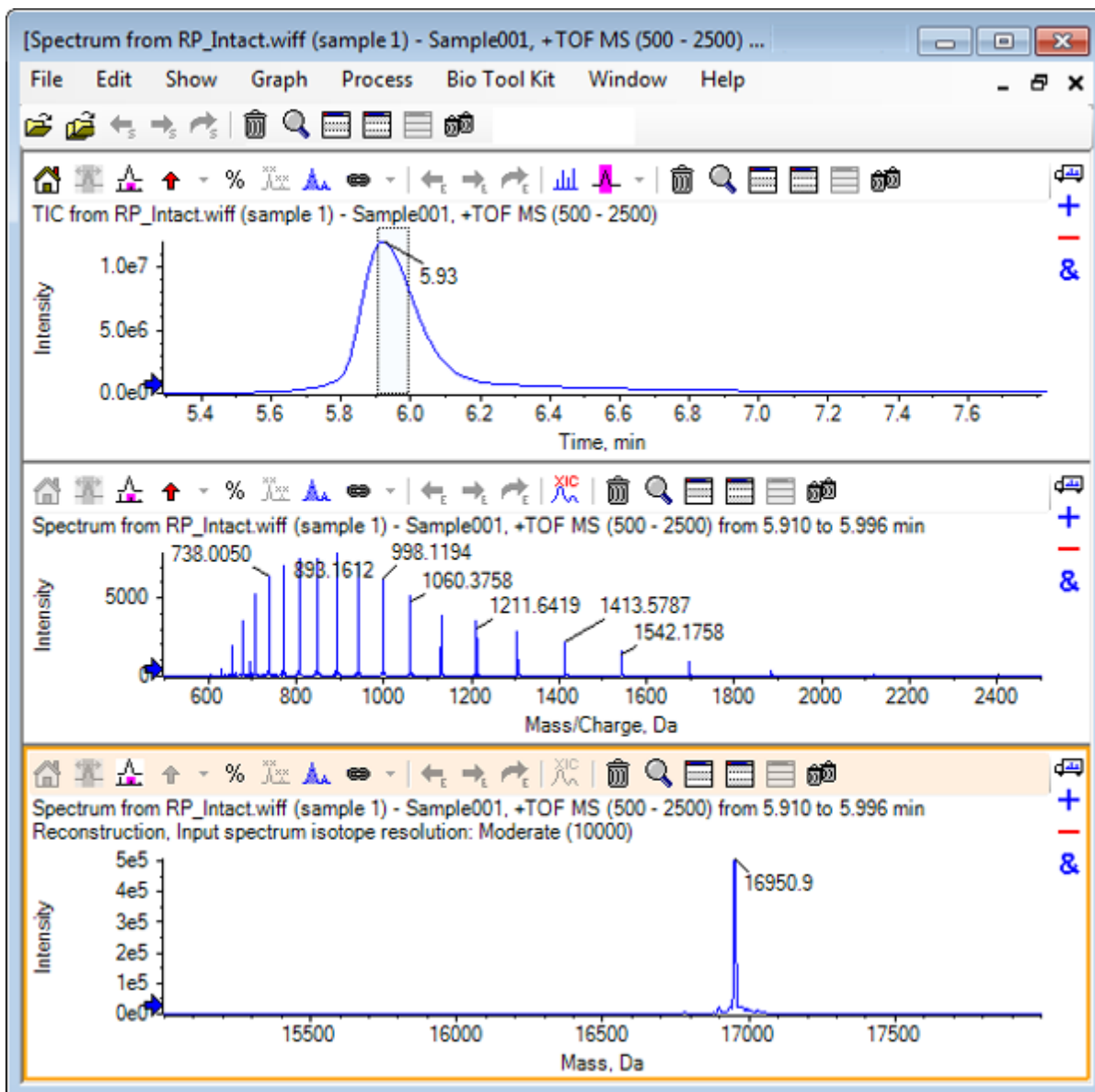
---

**Remarque** : Pour les données acquises en utilisant un système quadripolaire, le paramètre Peak width s'affiche à la place du paramètre Input spectrum isotope resolution.

---

8. Sélectionnez une valeur appropriée pour le champ **Charge agent** : H+.
9. Cliquez sur **OK**.  
Le logiciel génère un spectre de la protéine reconstituée dans un volet séparé intitulé : **Reconstruction, Input spectrum isotope resolution [user selection]**.

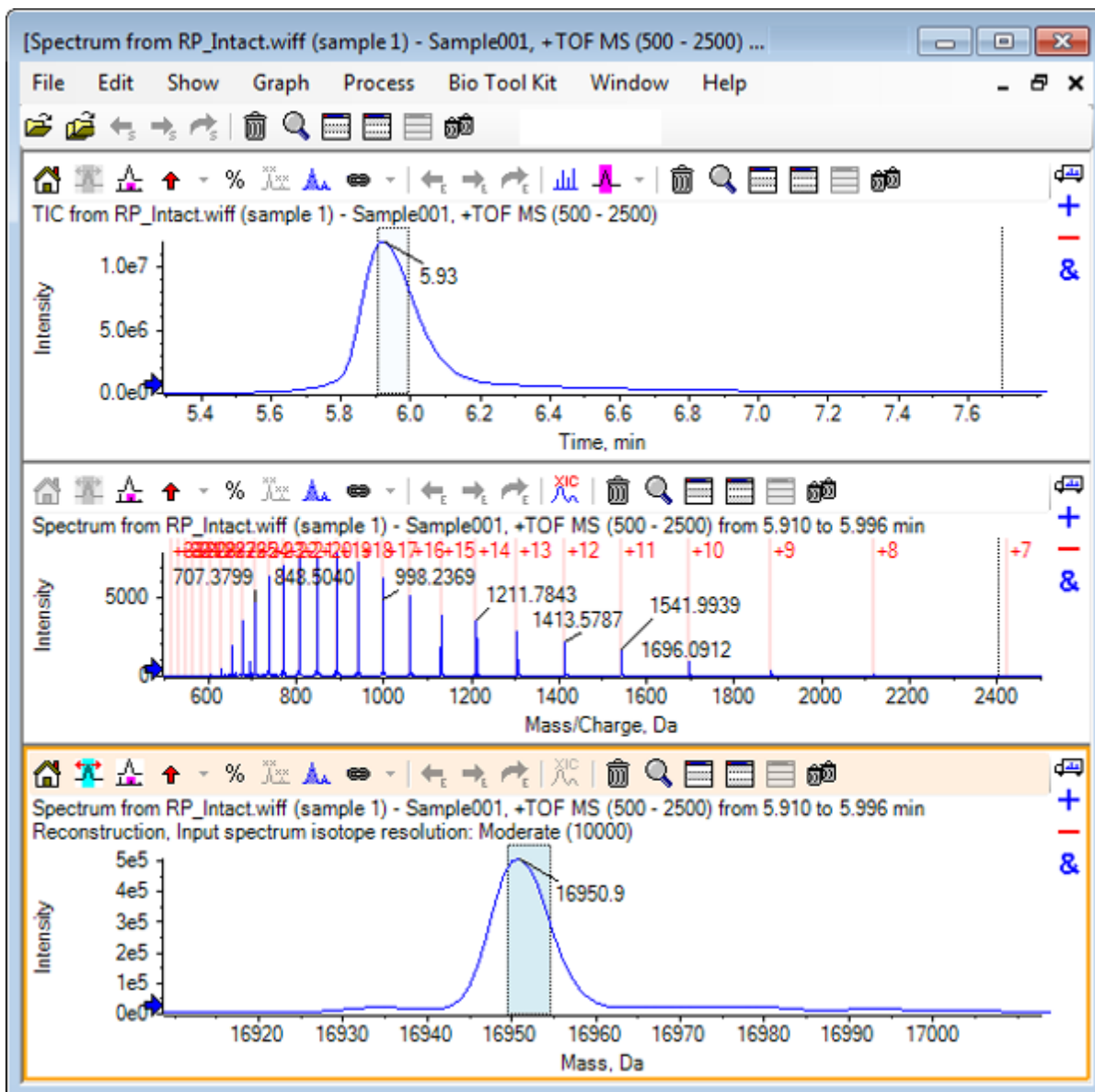
Illustration D-103 : Volet Reconstitution



**Remarque :** Pour les données acquises en utilisant un système quadripolaire, le titre du volet est le suivant : Reconstruction, Peak width [value].

10. Sélectionnez le pic de protéine reconstituée.  
Les points forts de la reconstitution manuelle verticale sont ajoutés au spectre sélectionné pour générer la protéine reconstituée.

## Illustration D-104 : Spectre avec points forts de la reconstitution manuelle



## Résumé

Dans cette section, les tâches suivantes sont abordées :

- Séquençage manuel des données de spectre MS/MS à partir d'un échantillon de protéine digérée.
- Association d'un spectre séquencé manuellement avec des fragments peptidiques.
- Ajout de marqueurs (Points forts de la reconstitution manuelle) indiquant les positions théoriques du rapport  $m/z$  d'une masse donnée à un spectre.
- Retrait des marqueurs d'un spectre.

## Tutoriel pour Explorer

---

- Obtention d'informations sur les séquences peptidiques théoriques qui résultent d'un clivage enzymatique défini par l'utilisateur d'une protéine spécifiée.
- Utilisation de la reconstitution peptidique LCMS pour identifier les pics spectraux et effectuer une déconvolution des pics spectraux identifiés.
- Association d'informations théoriques sur le Protein Pane à une liste des pics reconstitués.
- Obtention de la masse moyenne (poids moléculaire) d'une protéine intacte.

# Nous contacter

---

## Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- En Europe : [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- En dehors de l'UE et de l'Amérique du Nord, visitez le site [sciex.com/education](http://sciex.com/education) pour obtenir les coordonnées.

## Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## Assistance technique SCIEX

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, consultez le site Web SCIEX à l'adresse [sciex.com](http://sciex.com) ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

- [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support)

## Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Documentation

Cette version du document remplace toutes les versions précédentes de ce document.

Adobe Acrobat Reader est nécessaire pour afficher ce document sous forme électronique. Pour télécharger la dernière version, accéder à <https://get.adobe.com/reader>.

Pour trouver la documentation du logiciel, consulter les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier.

Pour trouver la documentation du matériel, consulter le DVD de documentation du système ou du composant.

Les dernières versions de la documentation sont disponibles sur le site Web SCIEX, à l'adresse [sciex.com/customer-documents](http://sciex.com/customer-documents).

## Nous contacter

---

**Remarque** : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us).

---