
Software **SCIEX OS**

Per sistemi X500 QTOF e ZenoTOF 7600

Guida per l'utente del software



Questo documento viene fornito ai clienti che hanno acquistato apparecchiature SCIEX come guida all'utilizzo e al funzionamento delle stesse. Questo documento è protetto da copyright e qualsiasi riproduzione, parziale o totale, dei suoi contenuti è severamente vietata, a meno che SCIEX non abbia autorizzato per iscritto diversamente.

Il software menzionato in questo documento viene fornito con un contratto di licenza. La copia, le modifiche e la distribuzione del software con qualsiasi mezzo sono vietate dalla legge, salvo diversa indicazione contenuta nel contratto di licenza. Inoltre, il contratto di licenza può vietare che il software venga disassemblato, sottoposto a reverse engineering o decompilato per qualsiasi scopo. Le garanzie sono indicate in questo documento.

Alcune parti di questo documento possono far riferimento a produttori terzi e/o a loro prodotti, che possono contenere parti i cui nomi siano registrati come marchi e/o utilizzati come marchi dei rispettivi proprietari. Tali riferimenti mirano unicamente a designare i prodotti di terzi forniti da SCIEX e incorporati nelle sue apparecchiature e non implicano alcun diritto e/o licenza circa l'utilizzo o il permesso concesso a terzi di utilizzare i nomi di tali produttori e/o dei loro prodotti come marchi.

Le garanzie di SCIEX sono limitate alle garanzie esplicite fornite al momento della vendita o della licenza dei propri prodotti e costituiscono le uniche ed esclusive dichiarazioni, garanzie e obbligazioni di SCIEX. SCIEX non rilascia altre garanzie di nessun tipo, né espresse né implicite, comprese, a titolo di esempio, garanzie di commerciabilità o di idoneità per un particolare scopo, derivanti da leggi o altri atti normativi o dovute a pratiche e usi commerciali, tutte espressamente escluse, né si assume alcuna responsabilità o passività potenziale, compresi danni indiretti o conseguenti, per qualsiasi utilizzo da parte dell'acquirente o per eventuali circostanze avverse conseguenti.

Solo per scopi di ricerca. Non usare in procedure diagnostiche.

I marchi e/o i marchi registrati menzionati nel presente documento, inclusi i loghi associati, sono di proprietà di AB Sciex Pte. Ltd., o dei rispettivi proprietari, negli Stati Uniti e/o in altri Paesi (vedere: sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ è utilizzato su licenza.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Sommario

Capitolo 1: Introduzione	9
Panoramica del software	9
Apertura del software	9
Informazioni sulla pagina Page	9
Informazioni sulla barra multifunzione e sul programma di avvio	12
Informazioni sul pannello di stato	13
Pannello Data Acquisition	18
Blocco dello schermo	19
Sblocco del software	20
Supporto per ELN (Electronic Laboratory Notebook)	20
Simboli e convenzioni presenti nella documentazione	20
Capitolo 2: Istruzioni per l'uso - Configurazione del dispositivo	22
Aggiunta di dispositivi	22
Eliminazione di dispositivi	22
Modifica dei parametri dei dispositivi	23
Capitolo 3: Istruzioni operative — Configurazione software	24
Informazioni su progetti e directory radice	24
Aggiunta di una directory radice	24
Rimuovere una directory radice	25
Specificare un account di rete sicura	25
Aggiunta di un progetto	25
Aggiunta di una sottocartella	26
Selezione delle opzioni della coda	26
Impostazioni per il sistema di gestione delle informazioni di laboratorio (LIMS)	27
Abilitazione della modalità schermo intero	27
Selezione delle impostazioni internazionali	27
Gestione delle librerie di composti	28
Importazione di un pacchetto software LibraryView	28
Importazione di un database di composti	28
Importazione di un pacchetto software Cliquid	29
Importazione di un file Excel	30
Importazione di un'istantanea del database della libreria	31
Importazione di un pacchetto libreria di terze parti	31
Installazione di un pacchetto software LibraryView con licenza	32
Conflitti di composti	34
Aggiunta di un composto	35
Aggiunta di uno spettro di massa a un composto	35
Capitolo 4: Istruzioni operative - Flussi di lavoro per utenti	37

Sommario

Analisti	37
Sviluppatori di metodi	37
Amministratori	38
Revisori	38
Capitolo 5: Istruzioni operative – Acquisizione	39
Area di lavoro MS Method	39
Creazione di un metodo MS	39
Creazione di un metodo MRM HR utilizzando la tecnica MRM HR guidata	42
Esperimenti con i metodi MS	43
Informazioni sui metodi MS	44
Calcolo dell'energia di collisione dinamica per i metodi MS	45
Apertura di un metodo MS	46
Esecuzione manuale di un metodo MS	46
Area di lavoro LC Method	48
Creazione di un metodo LC	49
Area di lavoro Batch	49
Gestione del lotto	54
Importazione di un lotto da un file	58
Importazione di un lotto da LIMS	59
Creazione manuale di un lotto	60
Utilizzo della funzione Plate Layout per creare un lotto	62
Creazione di una tabella di riferimento di ionizzazione	63
Calibrazione del sistema usando il CDS	64
Calibrazione del sistema utilizzando un metodo LC	65
Gestione delle concentrazioni dei componenti	65
Gestione delle regole di decisione	66
Equilibratura del sistema	67
Inviare un lotto	68
Invio di un campione singolo alla coda dall'area di lavoro Batch	68
Invio di più campioni alla coda dall'area di lavoro Batch	69
Area di lavoro Queue	69
Gestione della coda	72
Mostrare o nascondere colonne	74
Icane della coda	75
Area di lavoro MS Tune	78
Eseguire una verifica rapida dello stato	78
Ottimizzazione del rilevatore	79
Tuning dell'unità Q1	80
Tuning TOF	80
Tuning dell'unità Q1 alta	81
Calibrazione ZenonTOF (sistemi ZenonTOF)	82
Esecuzione dell'ottimizzazione EAD (sistemi ZenonTOF)	83
Esecuzione della riduzione di fondo EI EAD (sistemi ZenonTOF)	83
Esecuzione della diagnostica EAD (sistemi ZenonTOF)	84
Inizializzazione ADC (sistemi ZenonTOF)	84
Procedura avanzata di risoluzione dei problemi	84
Restore Instrument Data	85

Capitolo 6: Istruzioni operative - Elaborazione	86
Area di lavoro Explorer.....	86
Apertura dei campioni.....	86
Verifica della presenza di un analita.....	86
Estrazione di ioni.....	87
Apertura di un cromatogramma ionico totale.....	88
Apertura di un cromatogramma picco base.....	90
Visualizzazione della tabella dati e picchi.....	92
Visualizzazione delle informazioni sui campioni.....	94
Visualizzazione delle informazioni sulla selezione del grafico.....	94
Modifica delle impostazioni nei grafici.....	96
Utilizzo dei dati nei grafici.....	97
Utilizzo degli strumenti per operazioni su due riquadri.....	102
Spostamento di riquadri o finestre.....	104
Esecuzione dello smoothing gaussiano.....	105
Dati di soglia.....	106
Dati di sottogruppi con selezione grafico.....	106
Sottrazione linea di base dal cromatogramma.....	107
Offset di cromatogramma.....	108
Centroide di uno spettro.....	109
Esportazione di dati come testo.....	110
Esportazione dell'elenco dei picchi come testo.....	111
Stampa dei dati.....	111
Ripristino delle opzioni.....	111
Impostazione delle opzioni.....	112
Area di lavoro Analytics.....	112
Definire i parametri di elaborazione predefinita per il progetto.....	113
Utilizzo dei layout dell'area di lavoro.....	114
Definizione delle impostazioni di esportazione sicura del progetto.....	116
Abilitazione dell'avviso di picco modificato del progetto.....	117
Creazione di un metodo di trattamento.....	117
Elaborazione dati.....	120
Lavorare con le Results Table.....	127
Verifica dei picchi.....	162
Analisi dei dati utilizzando le statistiche.....	174
Vista della curva di calibrazione.....	177
Analisi dei dati mediante i diagrammi metrici.....	178
Modifica dei modelli di report.....	179
Modelli Reporter.....	181
Capitolo 7: Eventi	195
Log eventi.....	195
Visualizzazione dei registri.....	196
Archiviazione dei registri.....	196
Visualizzazione dei registri archiviati.....	197
Stampa dei registri.....	197
Archivi dei log eventi.....	197

Sommario

Capitolo 8: Auditing	199
Visualizzazione dei record audit trail.....	199
Filtraggio degli eventi controllati utilizzando la ricerca per parola chiave.....	199
Filtraggio degli eventi controllati utilizzando un insieme di criteri specificati.....	199
Stampa di un audit trail.....	201
Appendice A: Principio di funzionamento—Software	202
Gestione dei dati.....	202
Tecniche di scansione.....	202
Vista dati diversa.....	202
Cromatogrammi.....	202
Spettri.....	204
Spettri di ricostruzione.....	204
Regole di decisione.....	205
Algoritmo Dynamic Background Subtraction.....	205
Analisi quantitativa.....	205
Standard Addition.....	206
Mass Reconstruction.....	207
Analisi qualitativa.....	208
Precisione della massa.....	208
Tempo di ritenzione.....	209
Modello isotopico.....	209
Ricerca nella libreria.....	209
Ricerca della formula.....	210
Integrazione.....	211
Parametri algoritmo di integrazione AutoPeak.....	211
Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4.....	216
Regressione.....	218
Equazioni di regressione.....	219
Tipi di ponderazione.....	219
Coefficiente di correlazione.....	220
Tipi di regressione.....	220
Rimozione automatica dei valori anomali.....	223
Results Table.....	224
Curve di calibrazione.....	224
Algoritmo segnale-rumore.....	225
Rumore relativo e calcoli segnale-rumore.....	225
Segnale-rumore mediante picco-picco.....	229
Segnale-rumore mediante deviazione standard.....	229
Definizione di aree del rumore.....	229
Colonne calcolate.....	230
Come orientarsi nell'interfaccia utente Calculated Column.....	230
Estrazione semplice di informazioni non predefinite.....	232
Formule aritmetiche semplici.....	232
Funzioni più complesse.....	233
Istruzioni IF	234
Treat Resulting Text Values As.....	235

Appendice B: Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto	237
Calibrazione del sistema in modalit� lotto.....	237
Calibrazione del sistema usando il CDS.....	237
Calibrazione del sistema con il sistema LC.....	240
Calibrazione in modalit� manuale.....	243
Calibrazione del sistema con il CDS.....	243
Calibrazione del sistema con il metodo LC.....	243
Appendice C: Masse esatte e formule chimiche	244
Appendice D: Esercitazione per Explorer	246
Introduzione.....	246
Organizzazione.....	246
Opzioni.....	247
Riquadri.....	247
Grafici.....	252
Sovrapposizioni.....	259
Aprire i file.....	260
Cromatogrammi e spettri.....	263
Contour Plot e mappe termiche.....	266
Lavorare con cromatogrammi e spettri.....	268
Aprire un file di dati.....	268
Mostrare il TIC per One Experiment.....	270
Mostrare un XIC per una formula molecolare nota.....	272
Creare e interagire con uno spettro.....	276
Utilizzo di un Contour Plot.....	282
Riepilogo.....	285
Lavorare con IDA Explorer.....	286
Mostrare e unire spettri.....	286
Filtrare dati IDA.....	290
Utilizzare uno spettro di riferimento.....	292
Riepilogo.....	293
Lavorare con Strumenti di struttura.....	293
Collegare una struttura a uno spettro MS/MS.....	293
Lavorare con i frammenti.....	297
Aggiungere sottostrutture a uno spettro.....	302
Lavorare con spettri MS/MS correlati.....	303
Riepilogo.....	306
Lavorare con campioni multipli.....	307
Lavorare con due campioni.....	307
Lavorare con pi� di due campioni.....	314
Riepilogo.....	321
Lavorare con la funzione Bio Tool Kit.....	322
Sequenza manuale.....	322
Aggiungere e rimuovere i punti chiave ricostruiti manualmente.....	332
Proteina digerita.....	335
Ricostruzione peptide cromatografia liquida a spettrometria di massa (LCMS).....	342

Sommario

Ricostruire la proteina	349
Riepilogo	354
Contatti	356
Formazione dei clienti	356
Centro di istruzione online	356
Assistenza SCIEX	356
Sicurezza informatica	356
Documentazione	356

Panoramica del software

Il software SCIEX OS contiene le funzionalità di controllo degli strumenti, acquisizione dati, elaborazione dati e segnalazione in un unico pacchetto.

Apertura del software

1. Selezionare il software dal menu Start:
 - Windows 7: **Start > All Programs > SCIEX > SCIEX OS > SCIEX OS**
 - Windows 10: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

Nota: Se il servizio **LibraryViewServiceHost** non è in esecuzione, viene visualizzata la finestra di dialogo User Account Control. Fare clic su **Yes** per avviare il servizio.

Se il software è configurato per la modalità Integrated Mode, viene visualizzata la pagina Home.

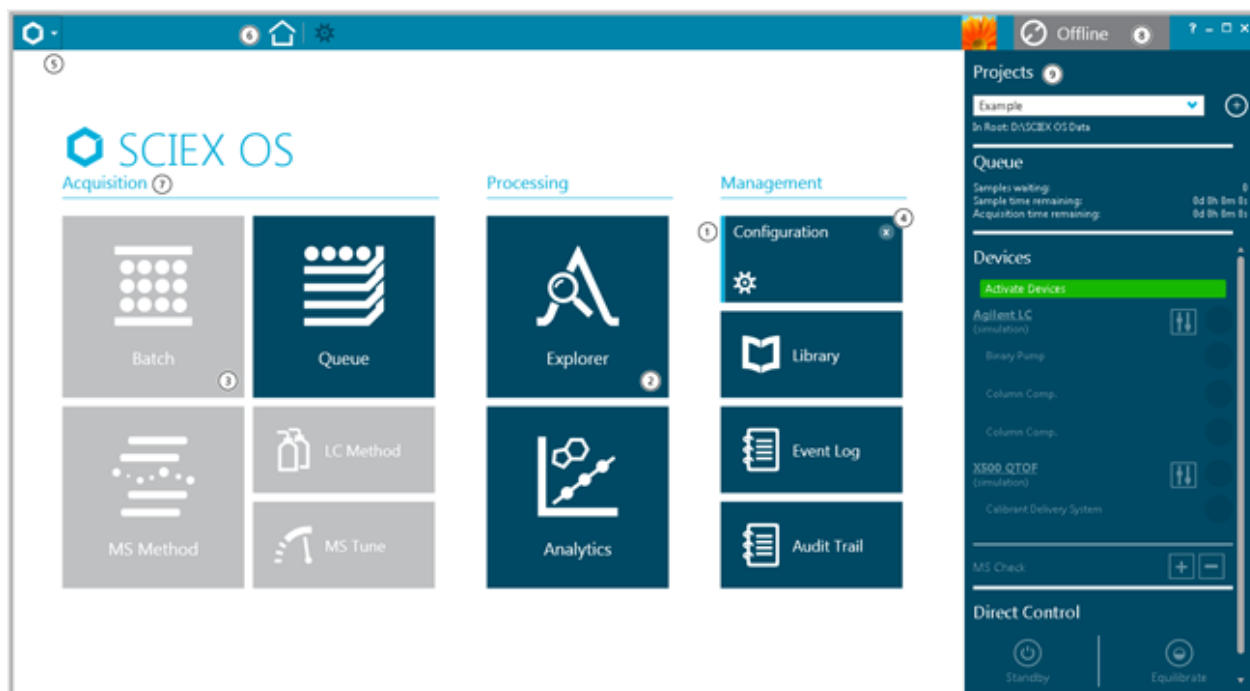
Se il software è configurato per la modalità Mixed Mode, viene visualizzata la pagina Logon. Continuare con i passaggi seguenti.

2. Se si utilizza il software Central Administrator Console (CAC) e SCIEX OS è configurato per l'amministrazione centralizzata, selezionare il gruppo di lavoro a cui accedere.
3. Se viene visualizzata la finestra di dialogo Logon, inserire il nome utente e la password di un utente autorizzato a utilizzare il software, quindi fare clic su **OK**. Viene visualizzata la pagina Home.

Informazioni sulla pagina Page

La pagina Page è costituita dai riquadri delle aree di lavoro, raggruppati per funzioni, il pannello di stato, la barra multifunzione e il programma di avvio. L'accesso alle aree di lavoro dipende dal ruolo assegnato all'utente e dalla licenza.

Figura 1-1: Pagina Home



Elemento	Descrizione
1	Una linea azzurra verticale a sinistra di un riquadro blu indica che l'area di lavoro è aperta, il lavoro è in corso e l'utente ha accesso alla funzionalità. Lo stato dell'area di lavoro aperta è mostrato nel riquadro.
2	Un riquadro blu indica che l'area di lavoro è chiusa.
3	Un riquadro grigio indica che l'area di lavoro non è abilitata.
4	Quando l'area di lavoro è aperta, nell'angolo in alto a destra del riquadro viene visualizzata l'icona chiudi (x).
5	Accesso al programma di avvio. Il programma di avvio è composto da un elenco di tutte le aree di lavoro. Fare clic su ▼ a destra dell'icona per aprire il programma di avvio.
6	La barra multifunzione. Fare riferimento alla sezione: Informazioni sulla barra multifunzione e sul programma di avvio . Per passare a un'area di lavoro diversa, fare clic su un'area di lavoro nell'elenco. L'area di lavoro attualmente aperta rimane attiva e la relativa icona viene visualizzata nella barra multifunzione. Per chiudere l'area di lavoro attiva, fare clic su . Per tornare alla pagina Home, fare clic su .
7	Funzioni: acquisizione, trattamento e gestione. L'accesso dipende dal ruolo assegnato all'utente e dalla licenza.
8	Stato del sistema. Fare clic sulla barra del titolo per mostrare o nascondere il pannello di stato.

Elemento	Descrizione
9	Il pannello di stato. Fare riferimento alla sezione: Informazioni sul pannello di stato .

Tabella 1-1: Funzioni

Etichetta	Descrizione
Acquisition	(Acquisizione) Utilizzare le funzioni del gruppo Acquisition per creare metodi, lotti e inviare i campioni per l'acquisizione. Inoltre, è possibile regolare lo spettrometro di massa utilizzando MS Tune.
Processing	(Elaborazione) Utilizzare le funzioni del gruppo Processing per elaborare i dati in modo quantitativo o qualitativo.
Management	(Gestione) Utilizzare le funzioni del gruppo Management per configurare i dispositivi e l'accesso al software e visualizzare il registro degli eventi.

Tabella 1-2: Riquadri

Etichetta	Descrizione
Batch	(Lotto) Utilizzare l'area di lavoro Batch per creare lotti e inviarli alla coda. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro Batch .
Queue	(Coda) Utilizzare l'area di lavoro Queue per monitorare lo stato di acquisizione ed elaborazione e gestire i campioni nella coda. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro Queue .
MS Method	(Metodo MS) Utilizzare l'area di lavoro MS Method per creare e modificare i metodi MS. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro MS Method .
LC Method	(Metodo LC) Utilizzare l'area di lavoro LC Method per creare e modificare i metodi LC. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro LC Method .
MS Tune	(Tuning MS) Utilizzare l'area di lavoro MS Tune per ottimizzare lo spettrometro di massa. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro MS Tune .
Explorer	(Esplora) Utilizzare l'area di lavoro Explorer per esaminare i dati acquisiti. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro Explorer .
Analytics	(Analisi) Utilizzare l'area di lavoro Analytics per elaborare e rivedere i dati acquisiti. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro Analytics .

Tabella 1-2: Riquadri (continua)

Etichetta	Descrizione
Configuration	(Configurazione) Utilizzare l'area di lavoro Configuration per configurare il software, aggiungere e attivare i dispositivi, assegnare ruoli utente e creare e assegnare mappe di audit. Fare riferimento al documento: <i>Guida online</i> .
Library	(Libreria) Utilizzare l'area di lavoro Library per gestire le librerie di composti.
Event Log	(Registro eventi) Utilizzare l'area di lavoro Event Log per visualizzare gli eventi del sistema, inclusi errori e avvertenze. Fare riferimento al documento: <i>Guida del direttore del laboratorio</i> .
Audit Trail	(Audit Trail) Utilizzare l'area di lavoro Audit Trail per visualizzare record di eventi software, come modifiche della configurazione ed elaborazione dei dati. Fare riferimento al documento: <i>Guida del direttore del laboratorio</i> .

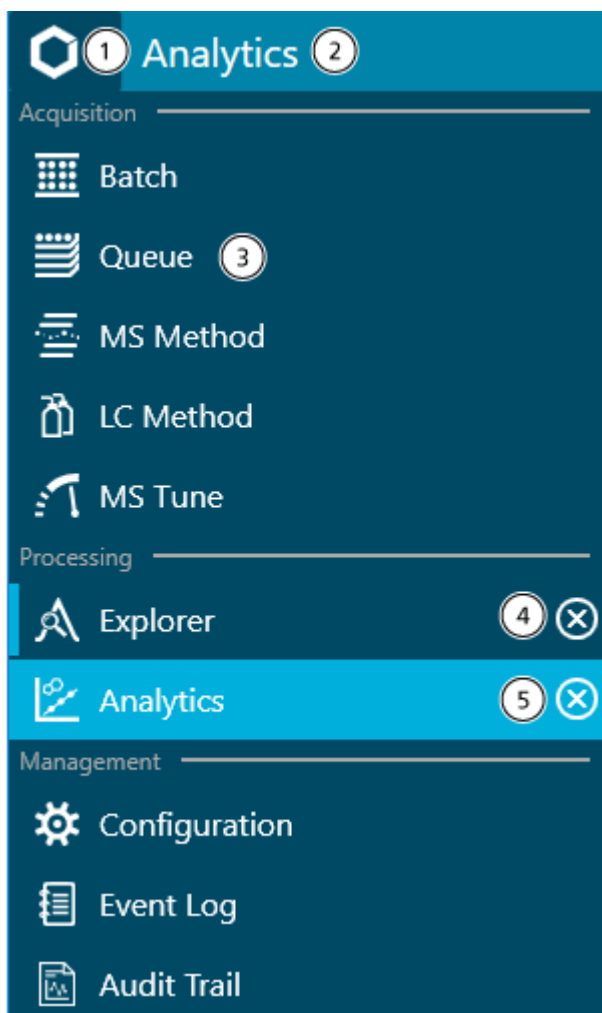
Informazioni sulla barra multifunzione e sul programma di avvio




Figura 1-2: Barra multifunzione



Elemento	Descrizione
1	Consente all'utente di aprire un'altra area di lavoro selezionandola dall'elenco. Questa area di lavoro diventa quella attiva. L'area di lavoro attiva in precedenza rimane aperta. Fare riferimento alla figura: Figura 1-3 .
2	Mostra il nome dell'area di lavoro attiva.
3	Apri la pagina Home.
4	Mostra le aree di lavoro aperte. L'area di lavoro è mostrata in bianco. Per rendere attiva un'area di lavoro, fare clic sull'icona dell'area di lavoro.
5	Mostra l'utente che ha effettuato l'accesso.
6	Mostra lo stato del sistema. Fare riferimento alla sezione: Informazioni sul pannello di stato .
7	Apri la Guida in linea. Fare clic su ?.

Figura 1-3: Programma di avvio



Elemento	Descrizione
1	Mostra l'elenco di aree di lavoro. Fare clic su  .
2	Mostra il nome dell'area di lavoro attiva.
3	Mostra lo stato delle aree di lavoro. Lo sfondo blu indica che l'area di lavoro è chiusa. Una barra verticale azzurra a sinistra indica che l'area di lavoro è aperta. Lo sfondo azzurro indica che l'area di lavoro è attiva.
4	Chiude un'area di lavoro aperta. Fare clic su  .
5	Chiude l'area di lavoro attiva. Fare clic su  .

Informazioni sul pannello di stato

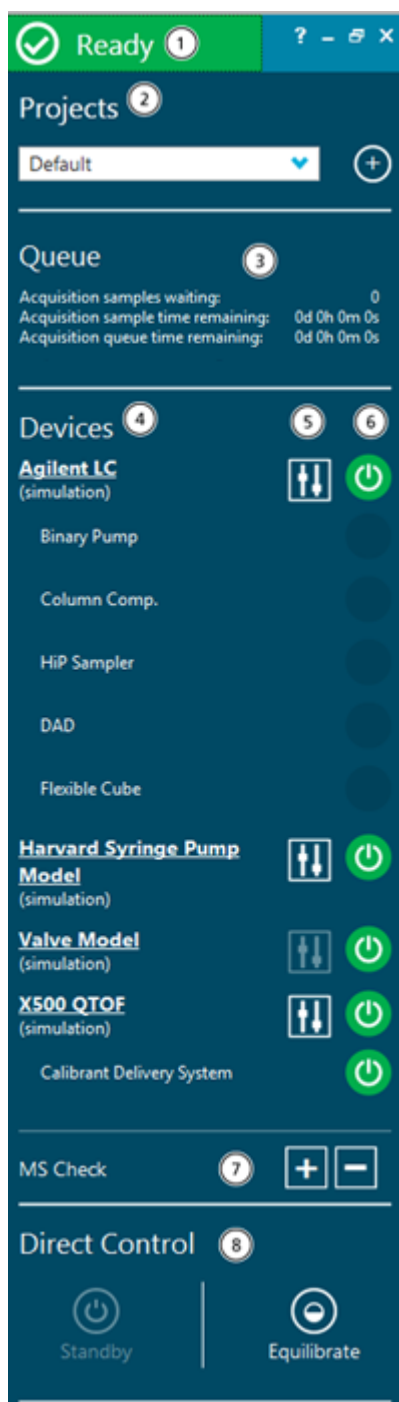
Per aprire questo pannello, fare clic sulla barra del titolo del pannello di stato. Fare riferimento alla figura: [Figura 1-2](#).

Introduzione

L'icona, il testo e il colore della barra del titolo di stato cambiano per indicare lo stato del sistema. Utilizzare il pannello di stato per compiere una delle seguenti operazioni:

- Aggiungere o selezionare un progetto.
- Visualizzare i campioni rimasti nella coda e il tempo residuo stimato per l'acquisizione del lotto.
- Visualizzare il numero di campioni rimasti nella coda e il tempo residuo stimato per il completamento della coda.
- Visualizzare lo stato del sistema o lo stato dei singoli dispositivi che sono stati attivati nell'elenco Devices nell'area di lavoro Configuration.
- Accedere al controllo diretto del dispositivo per avviare o arrestare i dispositivi.
- Visualizzare i dettagli del dispositivo.
- Portare lo spettrometro di massa o il sistema LC in stato Standby.
- Verificare e calibrare le modalità TOF MS e TOF MS/MS.
- Equilibrare il sistema.

Figura 1-4: Pannello di stato SCIEX OS



Introduzione


Elemento	Descrizione
1	Mostra lo stato del sistema. Fare clic sulla barra del titolo per mostrare o nascondere il pannello di stato. <ul style="list-style-type: none">• Ready è indicato in verde.• Lo stato offline è indicato da una spia grigia.• Equilibrating, Running e Loading sono indicati in blu.• Stopped e Stopping sono indicati in giallo.• Fault è indicato in rosso.
2	Mostra il progetto corrente. Per modificare un progetto esistente, selezionarlo dall'elenco. Per aggiungere un progetto, fare clic su Create Project () , digitare il nome del progetto e fare clic su OK .
3	Mostra lo stato dei campioni nella coda.
4	Mostra lo stato dei dispositivi. Fare clic sul titolo del dispositivo per aprire la finestra di dialogo Device Details e visualizzare i dettagli. Se i dispositivi sono inattivi, il pulsante Activate Devices è mostrato in questa sezione del pannello di stato. Fare clic su questo pulsante per attivare i dispositivi.
5	Fare clic sull'icona Direct Device Control per accedere ai controlli del dispositivo. La siringa opzionale può essere avviata o interrotta nella finestra di dialogo Device Control.
6	Mostra lo stato del dispositivo. L'icona è un indicatore di sola visualizzazione dello stato del dispositivo.
7	Fare clic per accedere alle procedure MS Tune.
8	Fare clic sul pulsante appropriato per equilibrare il sistema o entrare in stato Standby. Fare riferimento alla sezione: Equilibratura del sistema .

Tabella 1-3: Sezioni del pannello di stato


Etichetta	Descrizione
Projects	(Progetti) Mostra il progetto corrente. Fare clic su Create Project () per creare un progetto. Fare riferimento alla sezione: Aggiunta di un progetto .

Tabella 1-3: Sezioni del pannello di stato (continua)




Etichetta	Descrizione
Queue	<p>(Coda) Mostra lo stato dei campioni nella coda. Sono fornite informazioni per:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Samples waiting (Campioni in attesa) • Sample time remaining (Tempo campione restante) • Acquisition time remaining (Tempo acquisizione restante) <p>Fare riferimento alla sezione: Gestione della coda.</p>
Devices	<p>(Dispositivi) Elenca i dispositivi nella configurazione attiva. Da questo elenco, è possibile gestire i dispositivi come segue:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Fare clic sul nome del dispositivo per aprire e visualizzare la finestra di dialogo Device Details. • Visualizzare lo stato dell'icona o spostare il cursore sopra l'icona di stato per visualizzare lo stato del dispositivo. • Fare clic su Direct device control () per aprire la finestra di dialogo Device Control.
MS Check	<p>(Controllo MS) Esegue la procedura di tuning MS in modalità Positiva (+) o Negativa (-).</p>
Direct Control	<p>(Controllo diretto) Consente all'utente di controllare manualmente il dispositivo. Fare clic su Standby per mettere il sistema in stato Standby. Fare clic su Equilibrate per aprire la finestra di dialogo Equilibrate. Fare riferimento alla sezione: Equilibratura del sistema.</p>

Tabella 1-4: Funzioni del pannello di stato

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Mostrare il pannello di stato	Fare clic sulla barra del titolo del pannello di stato ridotto a icona. Fare riferimento alla figura: Figura 1-2 .
Nascondere il pannello di stato	Fare clic sulla barra del titolo del pannello di stato quando è visualizzata.

Tabella 1-4: Funzioni del pannello di stato (continua)

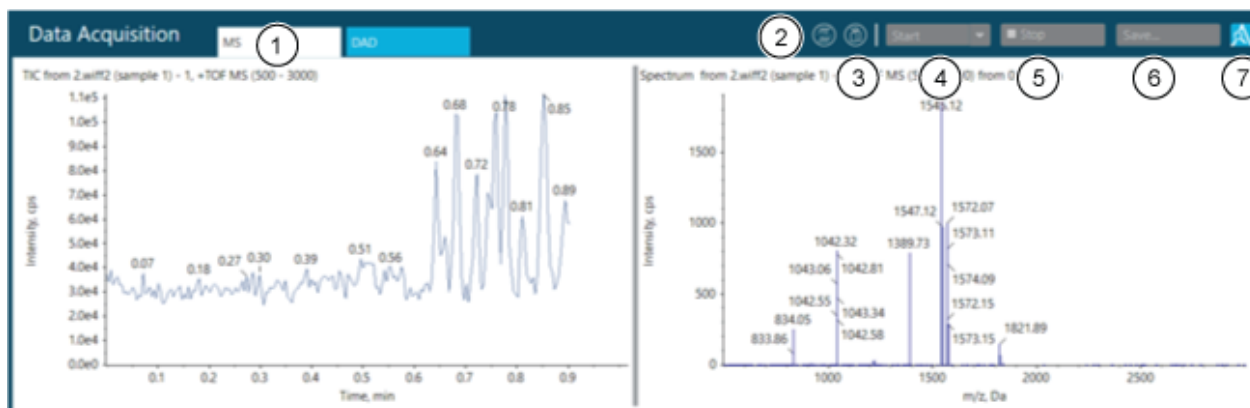
Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Modificare il progetto attivo	<p>Selezionare un progetto dall'elenco Projects nel pannello di stato.</p> <hr/> <p>Suggerimento! Fare clic su Create Project () per creare un progetto. Digitare il nome del progetto e fare clic su OK.</p> <hr/>
Controllare lo stato del dispositivo	<ol style="list-style-type: none">1. Nel pannello di stato, fare clic su Direct device control () a destra del titolo del dispositivo. Viene visualizzata la finestra di dialogo Device Control.2. Avviare, arrestare o aggiornare il dispositivo secondo necessità.3. Fare clic su OK. <p>Utilizzare questa procedura per ottenere un feedback dettagliato sullo stato di un dispositivo. Per esempio, temperature, pressioni e tensioni. Per monitorare lo stato del dispositivo, fare clic sull'icona nell'estrema destra del titolo del dispositivo.</p>

Pannello Data Acquisition

Utilizzare il pannello Data Acquisition per avviare e monitorare l'acquisizione dei dati in tempo reale. Gli utenti possono anche modificare i parametri del metodo di acquisizione durante l'acquisizione dei dati in tempo reale nonché salvare o aprire i dati nell'area di lavoro Explorer (Esplora dati).

Suggerimento! Fare clic nella parte superiore del pannello Data Acquisition e trascinare verso l'alto o verso il basso per ridimensionare il contenuto.

Figura 1-5: Pannello Data Acquisition



Elemento	Descrizione
1	Mostra TIC e spettro o XIC. Se è attivo un rilevatore, vengono mostrati anche i dati DAD o UV.
2	Metodo MS. Passare il puntatore del mouse per mostrare il nome del metodo MS in esecuzione.
3	Metodo LC. Passare il puntatore del mouse per mostrare il nome del metodo LC in esecuzione.
4	Fare clic su Start per avviare l'acquisizione manuale. Fare clic su Start > Start with LC per aprire la finestra di dialogo Start with LC.
5	Fare clic qui per arrestare l'acquisizione manuale.
6	Fare clic qui per salvare i dati.
7	Fare clic qui per esplorare i dati in tempo reale.

Blocco dello schermo

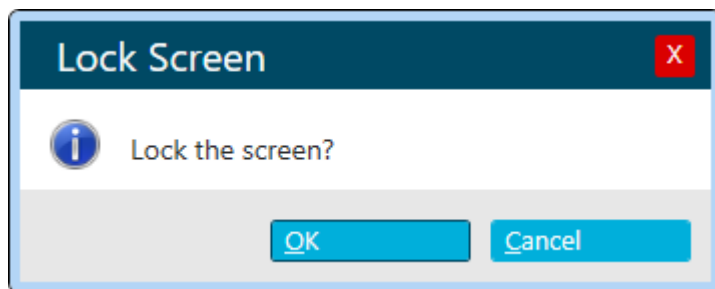
Per impedire l'accesso non autorizzato al software quando la workstation è incustodita, bloccare il software. Mentre il software è bloccato, le eventuali acquisizioni o elaborazioni in corso proseguono.

Al termine del periodo di tempo di Auto Logoff, l'utente viene disconnesso. L'acquisizione continua.

Nota: La disconnessione non viene effettuata se è in corso l'elaborazione o se la Results Table non è stata salvata.

1. Premere **Ctrl+Q**.

Figura 1-6: Finestra di dialogo Lock Screen



2. Fare clic su **OK**.
Viene aperta la finestra di dialogo SCIEX OS is Locked.

Sblocco del software

Se il software è bloccato, l'utente attualmente connesso può sbloccarlo.

Nota: Gli altri utenti non possono sbloccare il software, ma un utente con l'autorizzazione **Force User Logoff** può disconnettere l'utente corrente.

Nella finestra di dialogo SCIEX OS is Locked, inserire la password dell'utente corrente, quindi fare clic su **Unlock**.

Supporto per ELN (Electronic Laboratory Notebook)

SCIEX non supporta alcuna soluzione ELN (Electronic Laboratory Notebook) specifica, tuttavia SCIEX offre prodotti, strumenti e servizi per facilitare l'importazione e l'esportazione di dati per l'integrazione in sistemi ELN:

- **Creazione di lotti:** SCIEX OS può importare file di lotti in formato csv e txt. Fare riferimento a [Area di lavoro Batch](#).
- **Caricamento dei risultati:** SCIEX OS può esportare dati in un file txt per l'uso in un sistema LIMS. Fare riferimento a [Area di lavoro Analytics](#).

Simboli e convenzioni presenti nella documentazione

Nella guida sono presenti i seguenti simboli e le seguenti convenzioni.



PERICOLO! La dicitura Pericolo indica un'azione che può causare infortuni gravi o fatali.



AVVERTENZA! La dicitura Avvertenza si riferisce a un'azione che potrebbe causare infortuni, se non si prendono le dovute precauzioni.

ATTENZIONE: la dicitura **Attenzione** si riferisce a un'operazione che potrebbe causare danni al sistema o una perdita di dati, se non si prendono le dovute precauzioni.

Nota: la nota mette in risalto informazioni importanti in una procedura o in una descrizione.

Suggerimento! Il suggerimento fornisce informazioni utili che aiutano nell'applicazione di tecniche e procedure presenti nel testo per una specifica necessità e contiene collegamenti a parti del testo, ma non è essenziale per il completamento di una procedura.

Istruzioni per l'uso - Configurazione del dispositivo

2

Utilizzare l'area di lavoro Configuration per:

- Attivare e disattivare i dispositivi
- Aggiungere ed eliminare i dispositivi
- Modificare le impostazioni dei dispositivi
- Testare i dispositivi

Aggiunta di dispositivi

Nota: Per evitare problemi di attivazione, aggiungere sempre lo spettrometro di massa prima di aggiungere qualsiasi altro dispositivo.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Devices**.
3. Se sono attivi dei dispositivi, fare clic su **Deactivate**.
4. Fare clic su **Add**.
Si apre la finestra di dialogo Device.
5. Nell'elenco **Type**, selezionare il tipo desiderato.
6. Nell'elenco **Model**, selezionare il modello desiderato.
7. Fare clic su **Settings** per modificare le impostazioni o ripristinare i valori predefiniti.
8. Fare clic su **Test Device** per verificare che il dispositivo sia configurato correttamente e disponibile per l'uso.
9. Fare clic su **Save**.
10. Ripetere i passaggi da 4 a 9 come richiesto.
11. Selezionare la casella di controllo **Activate** di fianco a ogni dispositivo da attivare, quindi fare clic su **Activate Devices**.
Tutti i dispositivi selezionati sono attivati.
12. Per modificare o eliminare i dispositivi, fare riferimento alla Guida in linea.

Eliminazione di dispositivi

Nota: se il dispositivo da eliminare fa parte di un sistema integrato, verranno eliminati anche tutti i dispositivi presenti nel sistema integrato. Gli utenti non possono eliminare un solo dispositivo in un sistema integrato.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Devices**.
3. Fare clic su **Deactivate**.
4. Selezionare un dispositivo.
5. Fare clic su **Delete**.
6. Selezionare la casella di controllo **Activate** di fianco a ogni dispositivo da attivare, quindi fare clic su **Activate Devices**.
Tutti i dispositivi selezionati sono attivati.

Modifica dei parametri dei dispositivi

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Devices**.
3. Se i dispositivi sono attivi, fare clic su **Deactivate**.
4. Selezionare il dispositivo da modificare.
5. Fare clic su **Edit**.
Si apre la finestra di dialogo Device.
6. (Opzionale) Modificare le proprietà del dispositivo nella sezione **Device Display Names**.
Per informazioni sulle proprietà, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
7. (Opzionale) Fare clic su **Settings** per visualizzare e modificare informazioni aggiuntive sul dispositivo. Utilizzare la finestra di dialogo Settings per eseguire queste attività:
 - Fare clic su **Restore Defaults** per ripristinare le impostazioni predefinite del dispositivo.
 - Fare clic su **Test Device** per verificare che il dispositivo sia configurato correttamente e disponibile per l'uso. Se il test viene superato, la finestra di dialogo Settings si chiude.
8. Fare clic su **Test Device** per verificare che il dispositivo sia configurato correttamente e disponibile per l'uso.
Se il test viene superato, viene visualizzato un messaggio di informazioni di colore verde. Altrimenti, un messaggio indica che la configurazione non è valida e richiede degli aggiornamenti.
9. Fare clic su **Save**.
10. Selezionare la casella di controllo **Activate** di fianco a ogni dispositivo da attivare, quindi fare clic su **Activate Devices**.
Tutti i dispositivi selezionati sono attivati.

Per informazioni sulla configurazione di utenti e ruoli, fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Informazioni su progetti e directory radice

Una directory radice è una cartella che contiene uno o più progetti. È la cartella in cui il software cerca i dati dei progetti. La directory radice predefinita è `C:\SCIEX OS Data`.

Per garantire un salvataggio sicuro delle informazioni del progetto, creare i progetti utilizzando il software SCIEX OS. Fare riferimento alla sezione: [Aggiunta di un progetto](#).


I dati di progetto possono essere organizzati in sottocartelle. Creare le sottocartelle con SCIEX OS. Fare riferimento alla sezione: [Aggiunta di una sottocartella](#).

Nota: Per i gruppi di lavoro amministrati dal software Central Administrator Console (CAC), la configurazione del software CAC controlla la possibilità di gestire progetti con SCIEX OS. Se l'opzione **Use central settings for projects** è selezionata nel software CAC, la pagina Projects è di sola lettura.

Aggiunta di una directory radice

La directory radice è la cartella in cui vengono memorizzati uno o più progetti.

Nota: Il software può salvare fino a dieci directory radice.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Projects**.
3. Nella sezione **Advanced**, fare clic su **Create Root** () accanto al campo **Current root directory**.
4. Digitare il percorso completo della cartella della directory radice.
La cartella è stata creata.

Suggerimento! Aniché digitare il percorso, fare clic su **Browse** e selezionare la cartella nella quale sarà creata la directory radice. Digitare "\" e il nome della cartella della directory radice alla fine del percorso.

Suggerimento! In alternativa, creare una cartella in File Explorer, navigare fino a e selezionare la cartella.


Nota: Per le installazioni di SCIEX OS con una licenza di elaborazione, la directory radice può essere una cartella del software Analyst `Analyst Data\Projects`.

5. Fare clic su **OK**.
La nuova directory radice diventa la directory radice del progetto attuale.

Rimuovere una directory radice

Il software mantiene un elenco delle ultime dieci directory radice utilizzate. L'utente può rimuovere le directory radice da questo elenco.

Nota: La **Current root directory** non può essere eliminata.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Projects**.
3. Nella sezione **Advanced**, fare clic su  accanto al campo **Current root directory**. Viene aperta la finestra di dialogo Clear Root Directory.
4. Selezionare le cartelle da rimuovere dall'elenco di directory radice, quindi fare clic su **OK**.


Specificare un account di rete sicura

Se i progetti vengono archiviati in una risorsa di rete, è possibile specificare un account di rete sicuro (SNA) per fare in modo che tutti gli utenti della workstation dispongano dell'accesso necessario alla risorsa di rete.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Projects**.
3. Nella sezione **Advanced**, fare clic su **Credentials for Secure Network Account**.
4. Digitare nome utente, password e dominio dell'account di rete sicuro definito nella risorsa di rete.
5. Fare clic su **OK**.

Aggiunta di un progetto

Il progetto memorizza metodi di acquisizione, dati, lotti, metodi di trattamento, risultati di elaborazione e così via. È consigliabile usare cartelle separate per ciascun progetto.

Suggerimento! È possibile creare i progetti anche facendo clic su **Create Project** () sul pannello di stato.


Non creare o copiare progetti, né incollare file all'esterno del software SCIEX OS.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.

2. Fare clic su **Projects**.
3. Fare clic su **Create Project** () vicino al campo **Current Project**.
Si apre la finestra di dialogo New Project.
4. Digitare il nome del progetto.
5. Fare clic su **OK**.

Aggiunta di una sottocartella

All'interno dei progetti, i dati possono essere ulteriormente organizzati in sottocartelle.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Projects**.
3. Fare clic su **Add Data Sub-Folders to any Project**.
Viene aperta la finestra di dialogo Add Data Sub-Folders.
4. Nel campo **SCIEX OS Project**, selezionare il progetto nel quale deve essere aggiunta la sottocartella.
5. Fare clic su **Add a new data sub-folder** () sopra la casella nella sezione **Project Data Sub-Folders**.
Si aprirà la finestra di dialogo Data Sub-Folder Name.
6. Digitare il nome della sottocartella
7. Fare clic su **Save**.
8. Chiudere la finestra di dialogo Add Data Sub-Folders.

Selezione delle opzioni della coda

Il software elabora i campioni inviati nell'elenco in modo sequenziale, eseguendo ogni campione con il metodo di acquisizione selezionato. Dopo che tutti i campioni sono stati acquisiti, la coda si interrompe e lo strumento entra in modalità Ready. Una volta trascorso il tempo impostato nel campo Instrument Idle Time, il sistema entra in stato Standby. In Standby, le pompe LC e il forno a colonna LC sono spenti e l'erogazione di corrente ad alcuni spettrometri di massa è sospesa. Il controllo temperatura dell'autocampionatore rimane attivo in modo da prevenire la degradazione dei campioni.

Solo gli utenti a cui sono state assegnate autorizzazioni di gestione della coda possono modificare la durata del tempo massimo di attività della coda dopo il completamento dell'ultima acquisizione e prima che lo strumento vada in Standby.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **Queue**.
3. Selezionare le opzioni di coda, se necessario. Per le descrizioni delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

4. Fare clic su **Save**.

Impostazioni per il sistema di gestione delle informazioni di laboratorio (LIMS)

Questa funzione consente di connettersi a un server LIMS. Gli utenti possono importare le informazioni sui lotti, nonché esportare i risultati a un LIMS.

Nota: Questa procedura non è richiesta per la connessione a Watson LIMS.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **LIMS Communication**.
3. Per comunicare con un LIMS, digitare l'URL del server LIMS nel campo **LIMS Server** e selezionare **Enable import from the specified LIMS server**.

Nota: Il reparto IT del cliente o il fornitore di middleware è responsabile della configurazione del server LIMS. Contattarli per conoscere l'URL o il percorso del server.

4. Fare clic su **Save**.

Abilitazione della modalità schermo intero

Selezionare questa funzione per utilizzare SCIEX OS come applicazione principale. Gli utenti non possono chiudere il software né accedere ad altri programmi software.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **General**.
3. In **General**, selezionare la casella di controllo **Enabled** per attivare **Full Screen Mode**.
4. Fare clic su **Save**.

Selezione delle impostazioni internazionali

Questa opzione applica le impostazioni internazionali e le impostazioni linguistiche selezionate nel Control Panel. Come separatore decimale è possibile utilizzare solo il punto “.” o la virgola “,”. Il raggruppamento cifre non è supportato.

1. Aprire l'area di lavoro Configuration.
2. Fare clic su **General**.
3. In **Regional Settings**, fare clic su **Apply**.
Le impostazioni internazionali impostate nel sistema operativo Windows verranno applicate al successivo riavvio del computer.
4. Fare clic su **Save**.
5. Riavviare il computer.

Gestione delle librerie di composti

Importazione di un pacchetto software LibraryView

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Fare clic su **LibraryView Package (*.lbp)** nella finestra di dialogo Library Importer.
5. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
6. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.
7. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** per importare tutti i composti.
 - Fare clic all'interno della riga appropriata per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per visualizzare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

8. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare la libreria appropriata dall'elenco **Add to Compound Library**.
 - Digitare il nome della libreria nel campo dell'elenco **Add to Compound Library**.
9. Fare clic su **Next**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

10. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
11. Fare clic su **Finish**.

Importazione di un database di composti

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **DiscoveryQuant Compound Database (*.mdb)**.
 - Fare clic su **Analyst Compound Database (*.mdb)**.
5. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
6. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.

7. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** per importare tutti i composti.
 - Fare clic all'interno della riga appropriata per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per visualizzare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

8. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare la libreria appropriata dall'elenco **Add to Compound Library**.
 - Digitare il nome della libreria nel campo dell'elenco **Add to Compound Library**.
9. Fare clic su **Next**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

10. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
11. Fare clic su **Finish**.

Importazione di un pacchetto software Cliquid

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Fare clic su **Cliquid Package (*.clq)** nella finestra di dialogo Library Importer.
5. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
6. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.
7. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** per importare tutti i composti.
 - Fare clic all'interno della riga appropriata per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per visualizzare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

8. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare la libreria appropriata dall'elenco **Add to Compound Library**.
 - Digitare il nome della libreria nel campo dell'elenco **Add to Compound Library**.
9. Fare clic su **Next**.

10. Digitare il nome dello spettrometro di massa nel campo **Instrument Name**, se richiesto, nella finestra di dialogo Instrument Name.
11. Fare clic su **OK**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

12. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
13. Fare clic su **Finish**.

Importazione di un file Excel

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Fare clic su **Excel file (*.xls)** nella finestra di dialogo Library Importer.
5. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
6. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.
7. Selezionare il foglio di lavoro **Excel worksheet to import** appropriato sulla finestra di dialogo Library Importer.
8. Se il foglio di lavoro contiene intestazioni di colonne, selezionare la casella di controllo accanto **Selected Excel Worksheet has headers**.
9. Digitare il nome dello spettrometro di massa nel campo **Instrument Name**, se richiesto, nella finestra di dialogo Instrument Name.
10. Selezionare l'intestazione appropriata per ciascuna colonna di informazioni.

Suggerimento! La selezione di **Compound:CompoundId** e **Compound:Name** è obbligatoria. Selezionare **--[not used]--** per le informazioni non richieste.

11. Fare clic su **Next**.
12. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** per importare tutti i composti.
 - Fare clic all'interno della riga appropriata per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per visualizzare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

13. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare la libreria appropriata dall'elenco **Add to Compound Library**.
 - Digitare il nome della libreria nel campo dell'elenco **Add to Compound Library**.

14. Fare clic su **Next**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

15. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
16. Fare clic su **Finish**.

Importazione di un'istantanea del database della libreria

ATTENZIONE: Rischio di perdita di dati. Effettuare il backup del software LibraryView corrente prima di eseguire questa procedura. Le informazioni contenute in questo pacchetto sovrascrivono tutti i dati esistenti nel database del software LibraryView. L'opzione Cancel non è disponibile dopo l'avvio dell'importazione.

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Fare clic su **Overwrite Database with Library Snapshot (*.lbp)** nella finestra di dialogo Library Importer.
5. Fare clic su **Yes** nella finestra di dialogo Warning.
6. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
7. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.
8. Fare clic su **Finish**.

Importazione di un pacchetto libreria di terze parti

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Import**.
4. Fare clic su **Third Party Library Package (*.tplp)** sulla finestra di dialogo Library Importer.
5. Selezionare il file corretto nella finestra di dialogo Open.
6. Selezionare il file, quindi fare clic su **Open**.
7. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** per importare tutti i composti.
 - Fare clic all'interno della riga appropriata per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per visualizzare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

8. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare la libreria appropriata dall'elenco **Add to Compound Library**.
 - Digitare il nome della libreria nel campo dell'elenco **Add to Compound Library**.
9. Fare clic su **Next**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

10. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
11. Fare clic su **Finish**.

Installazione di un pacchetto software LibraryView con licenza

Nota: deve essere installato il software LibraryView.

Nota: Per ottenere la licenza del software LibraryView è necessario l'accesso a Internet. Se il computer non dispone di connessione a Internet, eseguire una copia dell'ID computer generato. Su un computer con accesso a Internet, andare alla pagina delle licenze del sito Web SCIEX e seguire le istruzioni per ottenere una licenza.

È possibile installare una libreria con licenza da un DVD o un file zip scaricato dal sito Web SCIEX. Il file applicativo può includere nomi di composti, informazioni sulla transizione del composto e spettri della libreria del composto.

1. Accedere al computer come utente Windows con privilegi di amministratore.
2. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Se la libreria viene installata da un DVD, caricare il DVD nell'unità DVD e continuare con il passaggio 5.
 - Se la libreria viene installata da un file scaricato, continuare con il passaggio 3.
3. Scaricare il file .zip richiesto dal sito Web SCIEX.

Suggerimento! Per evitare potenziali problemi di installazione, salvare il file in una posizione che non sia il desktop del computer.

4. Al termine del download, fare clic con il pulsante destro del mouse sul file scaricato, quindi scegliere **Extract All**.
5. Sfogliare i file estratti o il contenuto del DVD e fare doppio clic su **Library.exe**.

Suggerimento! Se viene visualizzata la finestra di dialogo User Account Control, fare clic su **Yes**.

Suggerimento! Se viene visualizzata la finestra di dialogo con il messaggio LibraryView Setup (Not Responding), chiudere la finestra del messaggio, quindi fare clic con il pulsante destro del mouse sul file **Library.exe** e selezionare l'opzione **Run as administrator** per riavviare l'installazione.

6. Fare clic su **Software Activation** nella finestra di dialogo LibraryViewPackages Feature Unavailable.
Si apre la finestra di dialogo LibraryViewPackages Activation.
7. Nell'apposito campo, digitare il codice di licenza esattamente come mostrato.
Se il codice di licenza non è disponibile, contattare sciex.com/request-support.
8. Fare clic su **Generate Computer ID**.
Viene creato un identificatore univoco per la workstation.
9. Fare clic su **Copy ID to Clipboard**.
10. Seguire le istruzioni per ottenere la licenza.

Una volta inviate le informazioni richieste, il file della licenza viene inviato tramite e-mail a tutti gli indirizzi indicati.
11. Chiudere la finestra del browser.
12. Una volta ricevuta l'e-mail contenente il file della licenza, copiare il file della licenza sul desktop della workstation.
13. Fare clic su **Install License File** nella finestra di dialogo LibraryViewPackages Activation.
14. Cercare e selezionare il file di licenza nella finestra di dialogo Select the new license file to be installed.
15. Fare clic su **Open**.
Le finestre di dialogo Select the new license file to be installed e LibraryViewPackage Activation si chiudono entrambe.
16. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Fare clic su **All** sopra la colonna **Compound** nella finestra di dialogo Library Importer per importare tutti i composti.
 - Fare clic sulla riga appropriata nella finestra di dialogo Library Importer per importare i singoli composti.

Suggerimento! Per un aiuto nell'individuazione dei composti, utilizzare il campo **Search**. Il testo digitato nel criterio di ricerca viene cercato e aggiornato per mostrare solo le informazioni che corrispondono ai criteri specificati.

17. Fare clic su **Next**.

Nota: Se l'importazione viene annullata prima che tutti i composti siano stati copiati nel database, i composti eventualmente già importati rimangono nel database. Il software non ripristina il database allo stato di pre-importazione.

18. Risolvere eventuali conflitti, se necessario.
19. Fare clic su **Finish**.

Conflitti di composti

Quando si installa una libreria contenente un gruppo di composti o si installano singoli composti, il software cerca nel database i composti con lo stesso nome o la stessa formula del composto nel pacchetto. Se vengono rilevati dei composti, il software contrassegna i composti corrispondenti nel pacchetto e attende l'input dell'utente per continuare.

Gli utenti possono:

- Unire le informazioni del composto. I nuovi spettri, transizioni e tempi di ritenzione derivati dal composto nel pacchetto vengono aggiunti alle informazioni sul composto memorizzate nel database.
- Sovrascrivere le informazioni del composto. Le informazioni sul composto derivate dal pacchetto sostituiscono le informazioni sul composto memorizzate nel database.
- Conservare le informazioni sul composto. Le informazioni sul composto presenti nel database vengono conservate e quelle derivate dal pacchetto vengono eliminate.

Le informazioni sui conflitti servono ad aiutare l'utente a fare la scelta corretta.

Visualizzazione dei conflitti di composti

1. Fare clic su **Resolve** accanto al composto nella finestra di dialogo Library Importer per visualizzare i dettagli del conflitto.
2. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Fare clic su **Keep Original** per mantenere le informazioni dei composti esistenti e ignorare le nuove informazioni.
 - Fare clic su **Use New** per sostituire le informazioni dei composti esistenti con le nuove.
3. Ripetere i passaggi 1 e 2 per ciascun composto.
4. Dopo aver risolto tutti i conflitti, fare clic su **Finish**.

Unione di composti

1. Nella finestra di dialogo Library Importer, eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Fare clic su **Merge** per unire nuovi spettri, transizioni e tempi di ritenzione dai singoli composti nel pacchetto di importazione con le informazioni del composto corrispondente memorizzate nel database.

- Fare clic su **Merge All** per unire nuovi spettri, transizioni e tempi di ritenzione da tutti i composti nel pacchetto di importazione con le informazioni del composto corrispondente memorizzate nel database.
2. Dopo aver risolto tutti i conflitti, fare clic su **Finish**.

Sovrascrivere i composti

1. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **Overwrite All** per sovrascrivere tutte le informazioni sui composti memorizzate nel database con le informazioni sul composto corrispondente dal pacchetto di importazione.
 - Fare clic su **Resolve** accanto al composto appropriato, quindi fare clic su **Use New** per sovrascrivere le informazioni sul composto archiviate nel database con le informazioni del composto corrispondente dal pacchetto di importazione.
2. Fare clic su **Finish** dopo aver risolto tutti i conflitti.

Mantenimento dei composti originali

1. Nella finestra di dialogo Library Importer, scegliere una delle seguenti opzioni:
 - Fare clic su **Keep All Original** per mantenere tutte le informazioni sui composti memorizzate nel database e scartare quelle dal pacchetto di importazione.
 - Fare clic su **Keep Original** accanto al composto appropriato per mantenere le informazioni sui singoli composti memorizzate nel database e scartare quelle dal pacchetto di importazione.
2. Fare clic su **Finish** dopo aver risolto tutti i conflitti.

Aggiunta di un composto

Nota: È anche possibile aggiungere composti a una libreria utilizzando l'opzione **Edit Library**.

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.
3. Fare clic sull'icona **Add**.

Nota: Il nome del composto è obbligatorio. Tutte le altre informazioni sono facoltative.

4. Inserire le informazioni appropriate nei campi della scheda Details.
5. Fare clic su **Save**.

Aggiunta di uno spettro di massa a un composto

1. Espandere l'elenco **Compounds** nel riquadro Manage.
2. Fare clic su **All Compounds**.

3. Fare doppio clic sul composto appropriato.
4. Fare clic sulla scheda **MS Spectra**.
5. Fare clic sull'icona **Edit Mode**.
6. Fare clic sull'icona **Add Spectra**.
7. Fare clic su **Open *.wiff file** sulla finestra di dialogo Add Mass Spectrum from *.wiff file to Compound.
8. Cercare e selezionare il file .wiff o .wiff2 appropriato nella finestra di dialogo Open.
9. Fare clic su **Open**.
10. Per aggiungere i composti a una libreria, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Per i dati IDA, espandere il campione e selezionare il composto appropriato nel riquadro di navigazione a sinistra.
 - Per i dati EMS, MRM e con loop, selezionare il campione adeguato.
11. Per aggiungere uno spettro al composto, effettuare una delle seguenti operazioni:
 - Per i dati IDA, fare clic su **Add Spectrum** nel riquadro Acquired Spectrum.
 - Per i dati EMS, MRM e con loop, fare doppio clic sul TIC, quindi fare clic su **Add Spectrum** nel riquadro Acquired Spectrum.
12. Ripetere i passi da 7 a 11 per ciascuno spettro da aggiungere.
13. Fare clic su **Save**.
14. Fare clic su **Save** nella scheda MS Spectra.

Istruzioni operative - Flussi di lavoro per utenti

4

Analisti

Attività	Fare riferimento a
Visualizzare la schermata principale e il pannello di stato per controllare lo stato del sistema.	Informazioni sulla pagina Page e Informazioni sul pannello di stato .
Creare e inviare un lotto utilizzando un foglio di calcolo Microsoft Excel, LIMS o manualmente. I metodi LC e MS devono essere bloccati dagli sviluppatori di metodi prima che i lotti vengano creati e inviati dagli analisti.	Area di lavoro Batch .
Visualizzare e gestire i campioni nella coda.	Area di lavoro Queue .
Elaborare e rivedere i dati nelle Results Table.	Area di lavoro Analytics .
Esplorare i dati.	Area di lavoro Explorer .

Sviluppatori di metodi

Attività	Fare riferimento a
Configurare il sistema.	<ul style="list-style-type: none">• Istruzioni per l'uso - Configurazione del dispositivo.• Definire i parametri di elaborazione predefinita per il progetto.• Personalizzazione della Results Table.
Eseguire il tuning dello spettrometro di massa.	Area di lavoro MS Tune .
Configurare i dispositivi di cromatografia liquida (LC).	La documentazione per il dispositivo LC.
Creare metodi LC.	Creazione di un metodo LC .
Creare metodi di spettrometro di massa (MS).	Area di lavoro MS Method .

Istruzioni operative - Flussi di lavoro per utenti

Attività	Fare riferimento a
Sviluppare metodi di trattamento.	Creazione di un metodo di trattamento.

Amministratori

Attività	Fare riferimento a
Impostare le autorizzazioni ai file di Windows.	<i>Guida del direttore del laboratorio.</i>
Configurare il LIMS.	Impostazioni per il sistema di gestione delle informazioni di laboratorio (LIMS).
Aggiungere utenti al software e assegnazione dei ruoli.	<i>Guida del direttore del laboratorio.</i>
Archiviare i registri.	Archiviazione dei registri.

Revisori

Attività	Fare riferimento a
Rivedere i risultati elaborati.	Area di lavoro Analytics.
Esplorare i dati.	Area di lavoro Explorer.
Rivedere i registri.	Visualizzazione dei registri.

Istruzioni operative – Acquisizione 5

Utilizzare le aree di lavoro seguenti per eseguire le attività di acquisizione:

- [Area di lavoro MS Method](#): creare e gestire metodi MS
- [Area di lavoro LC Method](#): creare e gestire metodi LC
- [Area di lavoro Batch](#): creare lotti e inviarli alla coda
- [Area di lavoro Queue](#): gestire i campioni in coda

Nota: Per evitare problemi di prestazioni o danneggiamento dei dati, non eseguire procedure di manutenzione del computer, come deframmentazione o pulizia del disco, scansioni antivirus o aggiornamenti Windows durante l'acquisizione dei campioni.

Area di lavoro MS Method

Utilizzare questa area di lavoro per creare e gestire i metodi dello spettrofotometro di massa (MS).

È possibile aprire più metodi nell'area di lavoro MS Method. Utilizzando il menu **Views**, l'utente può modificare la disposizione delle finestre di metodo in visualizzazioni a schede, affiancate in verticale, affiancate in orizzontale o mobili. Nella visualizzazione mobile, le finestre possono essere ridimensionate, ingrandite o ridotte, spostate all'esterno della finestra SCIEX OS e spostate in un monitor diverso.

La barra del titolo della finestra del metodo contiene il metodo e i nomi di progetto. Nelle visualizzazioni affiancate e mobili, la barra del titolo del metodo attivo è blu e le barre del titolo degli altri metodi sono grigie. Nella visualizzazione a schede, la scheda del metodo attivo è bianca, mentre le schede degli altri metodi sono blu.

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Creazione di un metodo MS

Utilizzare i seguenti riferimenti secondo necessità:

- [Esperimenti con i metodi MS](#)
- [Informazioni sui metodi MS](#)
- [Calcolo dell'energia di collisione dinamica per i metodi MS](#)

1. Aprire l'area di lavoro **MS Methods**.
2. Fare clic su **New**, quindi fare clic su un metodo.
3. (Opzionale) Fare clic su **Options** e selezionare i seguenti elementi secondo necessità:

Tabella 5-1: Menu Options

Parametro	Descrizione
Apply experiment scheduling	(Applica programmazione esperimento) Selezionare per applicare la finestra temporale di ritenzione quando verranno eseguiti gli esperimenti. Per l'esecuzione degli esperimenti in loop, uno dei tempi di inizio dell'esecuzione deve essere 0 e uno dei tempi di interruzione dell'esecuzione deve essere uguale alla durata del metodo.
Apply ionization scheduling	(Applica programmazione ionizzazione) Selezionare per mostrare ionization start time e ionization stop time .
Show EAD parameters	(Mostra parametri EAD) (sistemi ZenoTOF 7600) Selezionare per mostrare i parametri EAD. I seguenti campi vengono abilitati quando è in uso la modalità frammentazione EAD e questa opzione è selezionata: <ul style="list-style-type: none">• Fragmentation mode: EAD• Electron KE• ETC• Electron beam current• Load time• EAD RF• Reaction time
Apply intact protein mode	(Applica modalità proteine intatte) (sistemi X500 QTOF) Selezionare per mostrare i campi della modalità proteine intatte.

Tabella 5-1: Menu Options (continua)

Parametro	Descrizione
Ramp	<p>(Rampa) Selezionare per incrementare gradualmente i parametri. Viene visualizzata la finestra di dialogo Ramp Compound Parameters.</p> <p>È possibile utilizzare l'incremento graduale per ottimizzare il parametro per gli ioni.</p> <p>L'incremento graduale di un parametro consiste nell'esecuzione automatica di un esperimento all'aumentare o al diminuire del valore di un parametro. È possibile incrementare gradualmente solo un parametro alla volta e gli incrementi devono essere nella stessa direzione, aumento o diminuzione entro i valori di inizio e fine. Gli utenti possono impostare le tensioni di inizio e fine e le dimensioni dei passaggi intermedi.</p> <p>Per i metodi TOF MS, è possibile incrementare gradualmente il parametro DP. Per i metodi TOF MSMS, è possibile incrementare gradualmente il parametro DP o CE. È possibile abilitare l'incremento graduale selezionando l'opzione Apply ramping to the compound parameter.</p>
Calibrate	<p>(Calibra) Selezionare per calibrare lo spettro e lo spettrometro di massa durante l'acquisizione. Viene visualizzata la finestra di dialogo Calibrate. Questa finestra di dialogo consente di selezionare la tabella di riferimento degli ioni adatta per la calibrazione.</p> <p>La funzionalità di calibrazione viene in genere utilizzata con il sistema CDS (calibrant delivery system). Per visualizzare i risultati di calibrazione, accedere all'area di lavoro Queue e fare clic sull'icona dello stato di acquisizione dell'esecuzione della calibrazione. Il processo di calibrazione dura 1 ora e 25 minuti.</p>
Dynamic collision energy	(Energia collisione dinamica) Fare clic per aprire la finestra di dialogo Dynamic Collision Energy.
Dynamic ETC	(Sistemi ZenoTOF 7600) (ETC dinamico) Fare clic per aprire la finestra di dialogo Dynamic ETC.

4. Immettere i valori nei campi secondo necessità. Per le descrizioni dei parametri, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. (Opzionale) Fare clic su **Add Experiment**.

Suggerimento! Utilizzare l'elenco accanto al campo **Experiment** per modificare o eliminare l'esperimento.

6. Eseguire una delle seguenti operazioni:

- Fare clic su **Save > Lock Method** per salvare e bloccare il metodo MS.
- Fare clic su **Save > Save**.
- Fare clic su **Save > Save as**.

Creazione di un metodo MRM HR utilizzando la tecnica MRM HR guidata

Utilizzare l'opzione **Guided** se è richiesto un maggiore controllo sulle tensioni di inizio e fine.

1. Aprire l'area di lavoro MS Method.
2. Fare clic su **New > Guided MRM HR**.
Viene visualizzata la pagina Preparation.
3. Selezionare la modalità:
 - **Guided**: per un maggiore controllo sulle tensioni di avvio e arresto.
 - **Automatic**: per consentire al software di selezionare automaticamente i valori di avvio e arresto della tensione.
4. Selezionare una **Polarity**.
5. Per utilizzare transizioni note, effettuare la seguente procedura:
 - a. Fare clic su **Use known transitions**.
 - b. Digitare **Compound ID**, **Precursor Ion (Da)** e **Fragment to Use (Da)**.
6. Per utilizzare transizioni non note, effettuare la seguente procedura:
 - a. Fare clic su **Find transitions automatically**.
 - b. Specificare **Compound Name**, **Charge**, **Precursor Ion** e **Number of Fragments to Use** nella tabella per ciascun composto.
7. Fare clic su **Continue**.
Viene visualizzata la pagina Initial Conditions.
8. Se necessario, regolare i **Source and Gas Parameters**.
9. Se l'elaborazione non avviene automaticamente, fare clic su **Start**.
10. Nella pagina Optimize DP, fare clic su **Ramp**.
Il software aumenta automaticamente il parametro DP e trova il valore DP più intenso per ciascuna transizione.
11. (Modalità automatica) Attendere finché non vengono identificati il DP e il CE ottimali per ognuno degli ioni prodotto e non viene aperta la pagina Review Report. Andare al passaggio [13](#).
12. Nella pagina Optimize DP, fare clic su **Ramp**.
Il software aumenta automaticamente il parametro DP e trova il valore DP più intenso per ciascuna transizione.
13. (Opzionale) Salvare il report attenendosi alla seguente procedura:
 - a. Nella pagina Report, fare clic su **Save report as..**

- b. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il report, digitare un **File name**, quindi fare clic su **Save**.
14. Fare clic su **Continue** per aprire il metodo ottimizzato nell'area di lavoro MS Method.
15. Digitare la durata del metodo richiesto nel campo **Method Duration**.
16. Effettuare una delle seguenti operazioni per salvare il metodo MS:
- Fare clic su **Save > Save** per salvare il metodo nello stesso progetto con lo stesso nome.
 - Fare clic su **Save > Save As** per salvare il metodo con un nuovo nome o in un progetto diverso.
 - Fare clic su **Save > Lock Method** per bloccare il metodo se è pronto per l'analisi di routine.

Nota: Bloccare il metodo per impedire agli utenti non autorizzati di modificarlo. Solo gli utenti che dispongono dell'autorizzazione **Lock/Unlock methods** possono modificare i metodi bloccati. Gli altri possono soltanto inviarli.

Viene visualizzata la finestra di dialogo Save As MS Method.

17. Inserire un nome nel campo **File Name**.
18. Fare clic su **Save**.

Esperimenti con i metodi MS

Utilizzare l'area di lavoro MS Method per creare o modificare i metodi MS. Un metodo MS può contenere uno o più esperimenti. Per impostazione predefinita, un nuovo metodo TOF MS contiene un solo esperimento.

I tipi di esperimenti MS disponibili sono:

- Tre esperimenti con metodo di base: TOF MS, TOF MSMS e Q1
- Tre esperimenti con metodo combinato: IDA, SWATH e MRM^{HR}

È inoltre disponibile una procedura guidata per la creazione di un esperimento MRM^{HR}. Al termine della procedura, i parametri vengono utilizzati per compilare il metodo MRM^{HR}.

Tabella 5-2: Esperimenti con metodo di base

Tipo	Definizione
TOF MS	Analisi della massa utilizzando la regione TOF. I valori m/z degli ioni vengono conservati sulla base del loro tempo di volo nella regione TOF.
TOF MSMS	Lo ione precursore viene selezionato utilizzando il filtro di massa quadrupolo. Il valore m/z degli ioni frammentati viene restituito sulla base del loro tempo di volo nelle regioni TOF MS. Questo esperimento viene utilizzato per determinare la struttura dei composti.

Tabella 5-2: Esperimenti con metodo di base (continua)

Tipo	Definizione
Q1	Acquisizione dei dati utilizzando il filtro di massa quadrupolo. L'intensità ionica viene restituita per le masse nell'intervallo di scansione.

Tabella 5-3: Esperimenti con metodo combinato

Tipo	Definizione
IDA	Un esperimento IDA (Information Dependent Acquisition, Acquisizione legata alle informazioni) analizza i dati mentre vengono acquisiti e modifica le condizioni dell'esperimento in base ai risultati dell'analisi. L'analisi dei risultati determina le masse su cui eseguire le scansioni dipendenti. L'utente ha il pieno controllo sui criteri che attivano un esperimento IDA e sui parametri dell'esperimento IDA che sono attivati.
SWATH	L'acquisizione SWATH consente di eseguire l'analisi MS/MS di tutti gli ioni precursori su un ampio intervallo di massa su una scala temporale LC. Il quadrupolo Q1 viene impostato su una larghezza della finestra di selezione più ampia (in genere da 10 Da a 50 Da) rispetto a quella utilizzata per le acquisizioni convenzionali degli ioni prodotto. Il passaggio attraverso più finestre di selezione sequenziali consente di coprire rapidamente un ampio intervallo di masse. Gli spettri di massa che ne risultano sono una composizione dei frammenti di tutti gli ioni precursori che hanno attraversato la rispettiva finestra di selezione Q1. Questa tecnica consente l'analisi MS/MS non mirata di tutte le specie in un campione.
MRM HR	L'esperimento MRM ^{HR} aiuta ad acquisire dati MS/MS di alta qualità dai composti con masse e tempi di ritenzione noti. Questa acquisizione può anche essere utilizzata per estrarre le masse dei frammenti con larghezze molto ridotte (0,02 Da) dagli spettri MSMS del TOF. Tale estrazione consente di ottenere una migliore selezione.
MRM HR guidata	Una procedura che passo dopo passo guida alla creazione di un metodo MRM ^{HR} . Al termine delle operazioni che compongono la procedura, i parametri vengono utilizzati per compilare il tipo di metodo MRM ^{HR} .

Informazioni sui metodi MS

Un metodo MS include i seguenti elementi:

- Parametri che appartengono all'intero metodo, inclusi i parametri **Source and Gas**.
- Uno o più esperimenti.
 - Ciascun metodo deve contenere almeno un esperimento.
 - Un metodo può contenere più di un esperimento. Ciò è indicato con il termine "esperimenti in loop".

- Gli esperimenti TOF MS e TOF MSMS possono essere messi in loop in un metodo fino a un massimo di 10 esperimenti. Gli esperimenti Q1 non possono essere messi in loop.
- Gli esperimenti IDA, SWATH, MRM^{HR} possono essere messi in loop in un metodo fino a un massimo di 2 esperimenti.

Nota: È possibile utilizzare solo combinazioni specifiche di esperimenti, ad esempio IDA + IDA, IDA + MRM^{HR}, IDA + SWATH e SWATH + MRM^{HR}.

- Ciascun esperimento presenta impostazioni avanzate specifiche.
- Singole scansioni in ciascun esperimento

Tabella 5-4: Funzioni dell'area di lavoro MS Methods

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Creare un metodo con più di un esperimento, ovvero esperimenti in loop.	Fare clic su Add Experiment e quindi fare clic su un tipo di esperimento.
Cambiare l'esperimento in un metodo MS esistente.	Fare clic sull'elenco accanto a Experiment , quindi fare clic su un tipo di esperimento.
Convertire un esperimento TOF MSMS in un esperimento IDA.	Fare clic sull'elenco accanto a Experiment , quindi fare clic su Add IDA criteria .
In un esperimento MRM ^{HR} , rimuovere TOF MS dal metodo.	Fare clic sull'elenco accanto a Experiment , quindi fare clic su Delete TOF MS (of MRM HR) . Nota: ciò si applica solo agli esperimenti in loop.
Eliminare un esperimento in presenza di più esperimenti in un metodo.	Fare clic sull'elenco accanto a Experiment , quindi fare clic su Delete experiment .
Per visualizzare le strutture dei metodi seguenti: <ul style="list-style-type: none"> • Il numero di esperimenti in un metodo. • La durata programmata di ciascun esperimento nel metodo. • Il numero di scansioni TOF MSMS per più esperimenti. 	Espandere o comprimere il pannello Method Overview sul lato sinistro dell'area di lavoro.

Calcolo dell'energia di collisione dinamica per i metodi MS

1. Aprire l'area di lavoro MS Method.

Istruzioni operative – Acquisizione

2. Creare o aprire un metodo MS che contenga i criteri IDA oppure i criteri di applicazione SWATH.
3. Fare clic su **Options > Dynamic collision energy**.
4. Modificare i dati nei campi secondo necessità.
5. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Per utilizzare i valori predefiniti salvati in precedenza per calcolare l'energia di collisione dinamica, fare clic su **Load Default Settings**.
 - Per salvare i valori correnti come predefiniti da utilizzare per calcolare l'energia di collisione dinamica in nuovi metodi, fare clic su **Save as Default Settings**.
 - Per applicare i valori correnti al metodo corrente per calcolare l'energia di collisione dinamica, fare clic su **Apply**.
 - Per chiudere la finestra di dialogo e annullare le modifiche, fare clic su **Cancel**.

Apertura di un metodo MS

Utilizzare questa procedura per aprire un metodo MS creato con SCIEX OS.

1. Aprire l'area di lavoro MS Method.
2. Fare clic su **Open**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Open MS Method che contiene l'elenco dei metodi MS nel progetto corrente.
3. (Opzionale) Se il metodo da aprire non si trova nel progetto corrente, selezionare il progetto che contiene il metodo da aprire.
4. Selezionare il metodo MS da aprire, quindi fare clic su **Open**.

Suggerimento! Per selezionare più metodi, utilizzare il tasto **Shift** o **Ctrl**.

Esecuzione manuale di un metodo MS

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Nell'area di lavoro MS Method, creare un nuovo metodo MS o aprire un metodo esistente. Fare riferimento alla sezione: Area di lavoro MS Method o Apertura di un metodo MS.

Utilizzare questa procedura per eseguire il metodo attivo nell'area di lavoro MS Method.

1. Fare clic sulla freccia giù sul pulsante **Start** nel pannello Data Acquisition e quindi fare clic su una delle opzioni seguenti:
 - **Start**: questa opzione esegue il metodo MS senza un LC.
 - **Start with LC**

Fare riferimento alla sezione: [Pannello Data Acquisition](#).

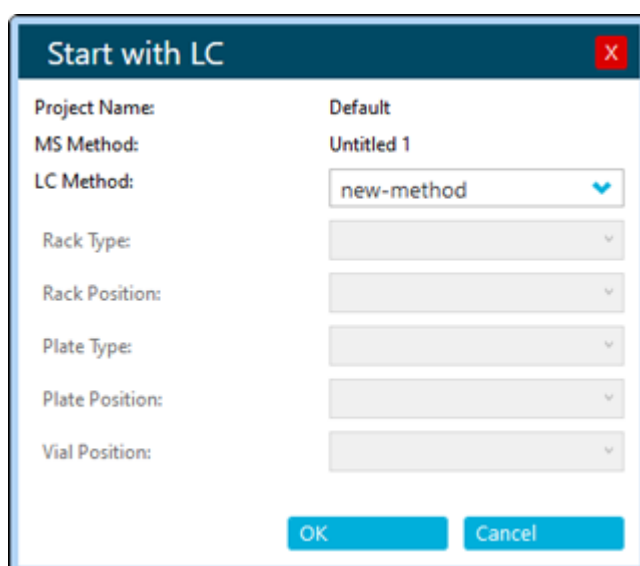


AVVERTENZA! Pericolo di incendio. Non dirigere più di 3 ml/min di solvente nella sorgente di ionizzazione. Anche se i componenti LC sono in grado di erogare una velocità di flusso fino a 5 ml/min l'invio di più di 3 ml/min di solvente potrebbe causare un accumulo di solvente nella sorgente di ionizzazione. Per garantire che la velocità di flusso massima erogata alla sorgente di ionizzazione non superi i 3 ml/min, è possibile dividere il flusso con un raccordo a T.

Se l'utente fa clic su **Start with LC**, viene visualizzata la finestra di dialogo Start with LC. Per informazioni sui campi di questa finestra di dialogo, fare riferimento al documento: *Guida online*.

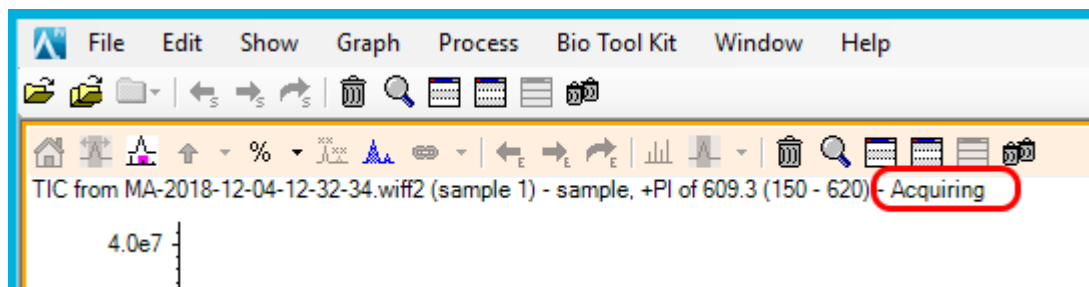
Nota: È necessario che il sistema LC sia attivato e che un metodo LC sia stato creato e salvato.

Figura 5-1: Finestra di dialogo Start with LC



2. (Opzionale) Per visualizzare i dati nell'area di lavoro Explorer, fare clic su **Open data exploration to view real-time data** (🔍) nel pannello Data Acquisition. L'acquisizione in tempo reale è indicata nel riquadro Explore dalle parole **Acquiring**, **Finished** o **Aborted** nel titolo del campione.

Figura 5-2: Acquisizione in tempo reale: acquisizione in corso



3. (Opzionale) Ottimizzare i parametri MS, come richiesto. Per una descrizione dei parametri, fare riferimento al documento: *Guida online*.
4. Fare clic su **Stop** nel pannello Data Acquisition.
5. (Opzionale) Per salvare i dati, attenersi ai passaggi seguenti:
 - a. Fare clic su **Save** per salvare i dati.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Save Data.
 - b. (Opzionale) Selezionare progetto e sottocartella, seapplicabile, in cui salvare i dati.
 - c. Inserire un nome nel campo **File Name**.
 - d. Fare clic su **Save**.
6. Effettuare una delle seguenti operazioni per salvare il metodo MS:
 - Fare clic su **Save > Save** per salvare il metodo nello stesso progetto con lo stesso nome.
 - Fare clic su **Save > Save As** per salvare il metodo con un nuovo nome o in un progetto diverso.
 - Fare clic su **Save > Lock Method** per bloccare il metodo se è pronto per l'analisi di routine.

Nota: Bloccare il metodo per impedire agli utenti non autorizzati di modificarlo. Solo gli utenti che dispongono dell'autorizzazione **Lock/Unlock methods** possono modificare i metodi bloccati. Gli altri possono soltanto inviarli.

Viene visualizzata la finestra di dialogo Save As MS Method.

7. Inserire un nome nel campo **File Name**.
8. Fare clic su **Save**.

Area di lavoro LC Method

Utilizzare questa area di lavoro per creare e gestire i metodi LC.

È possibile aprire più metodi nell'area di lavoro LC Method. Utilizzando il menu **Views**, l'utente può modificare la disposizione delle finestre di metodo in visualizzazioni a schede, affiancate in verticale, affiancate in orizzontale o mobili. Nella visualizzazione mobile,

le finestre possono essere ridimensionate, ingrandite o ridotte, spostate all'esterno della finestra SCIEX OS e spostate in un monitor diverso.

La barra del titolo della finestra del metodo contiene il metodo e i nomi di progetto. Nelle visualizzazioni affiancate e mobili, la barra del titolo del metodo attivo è blu e le barre del titolo degli altri metodi sono grigie. Nella visualizzazione a schede, la scheda del metodo attivo è bianca, mentre le schede degli altri metodi sono blu.

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Creazione di un metodo LC

Fare riferimento alla documentazione fornita con il dispositivo LC.

1. Aprire l'area di lavoro LC Method.
2. Fare clic su **New**.
3. Fare clic su un dispositivo nel pannello a sinistra e modificare i campi secondo necessità.
4. Salvare e bloccare opzionalmente il metodo LC facendo clic su uno dei seguenti comandi:
 - **Save**: per salvare il metodo LC.
 - **Save > Lock Method**: per salvare e bloccare il metodo LC.

Viene visualizzata la finestra di dialogo Save As LC Method.

5. Digitare un nome per il metodo LC nel campo **File Name** e fare clic su **Save**.

Area di lavoro Batch

L'area di lavoro Batch contiene informazioni su un set di campioni da acquisire e, facoltativamente, elaborare. I lotti comunicano al software l'ordine secondo il quale i campioni devono essere acquisiti ed elaborati.

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Nota: Per l'autocampionatore selezionato, il tipo rack, la posizione rack, il tipo piastra, la posizione piastra e la posizione fiala dipendono tutti l'uno dall'altro e solo determinati valori sono validi.

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch


Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Sample and method information (Informazioni su campione e metodo) 		
Sample Name	(Nome campione) Nome del campione.	Meno di 252 caratteri.

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch (continua)

Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Sample ID	(ID campione) Un numero personalizzato o un altro identificatore per il campione.	Meno di 252 caratteri. Il campo Sample ID non può contenere i seguenti caratteri non validi: \ / : ; * ? " < > =
Barcode ID	(ID codice a barre) ID univoco da un campione.	Meno di 250 caratteri.
MS Method	(Metodo MS) Nome del metodo.	Il metodo MS deve esistere nel progetto corrente. Il campo non distingue tra maiuscole e minuscole.
LC Method	(Metodo LC) Nome del metodo di cromatografia liquida.	Il metodo LC deve esistere nel progetto attuale. Il campo non distingue tra maiuscole e minuscole.
Rack Type	(Tipo di rack) Il tipo di rack per l'autocampionatore.	Deve essere una delle scelte valide per l'autocampionatore specificato nel metodo LC.
Rack Position	(Posizione del rack) La posizione del rack sul vassoio.	Valore numerico.
Plate Type	(Tipo di piastra) Il tipo di piastra a pozzetti nell'autocampionatore. Nota: Questa colonna non è disponibile se Rack Type descrive le fiale.	Deve essere una delle scelte valide per l'autocampionatore specificato nel metodo LC.
Plate Position	(Posizione piastra) La posizione della piastra sul rack.	Deve corrispondere ad una delle posizioni piastra predefinite dell'Autocampionatore.
Vial Position	(Posizione fiala) (Metodi LC) La posizione della fiala in un rack o su una piastra.	Valore numerico. I valore massimo non deve essere superiore al numero di fiale nel rack.

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch (continua)

Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Injection Volume (µL)	<p>(Volume di iniezione (µL)) La quantità di campione da iniettare.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Solo per i metodi LC, il volume di iniezione viene ricavato dal metodo LC. L'utente può sostituire questo volume di iniezione nell'area di lavoro Batch o nel file del lotto importato. Quando viene inviato il lotto, il volume di iniezione viene convalidato rispetto all'intervallo supportato dal dispositivo LC.</p> <p>Per ripristinare il volume di iniezione specificato nel metodo LC, eliminare il contenuto di questo campo, quindi selezionare di nuovo il metodo LC nel campo LC Method.</p> <hr/>	Valore numerico.
Sample Type	(Tipo di campione) Il tipo di campione.	Accertarsi che il tipo di campione corrisponda a uno dei tipi di campione predefiniti. Qualsiasi tipo che non corrisponde viene automaticamente sostituita con Unknown.
Dilution Factor	(Fattore di diluizione) Il fattore di diluizione per i singoli campioni.	<p>Per i metodi sviluppati da SCIEX, il valore deve essere 1,000000.</p> <p>Deve essere un valore maggiore di zero e con sei decimali. Il valore predefinito è 1,000000. Non lasciare vuoto il campo.</p>

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch (continua)

Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Data File	(File di dati) Il nome del file con il quale sono stati salvati i dati acquisiti. Includere il percorso completo alla sottocartella in cui sarà archiviato il file.	<p>Deve essere inferiore a 252 caratteri. Il numero totale di caratteri include il numero di caratteri nel percorso della sottocartella dei dati. Il file dei dati non può contenere alcuno dei seguenti caratteri non validi: \ / : ; * ? " < > =</p> <hr/> <p>Suggerimento! Fare clic sulla freccia e selezionare una sottocartella dall'elenco o digitare il nome di una nuova sottocartella. Accertarsi di includere una barra (\) tra il nome della sottocartella e del file. Se la sottocartella non esiste, sarà creata al momento dell'esecuzione del lotto.</p>
Processing Method	<p>(Metodo di trattamento) Nome del metodo. Se sarà utilizzato un Results File esistente, lasciare questo campo vuoto. Quando è selezionato un Results File esistente, il valore *Embedded Method* viene mostrato automaticamente in questo campo.</p> <hr/> <p>Nota: Il metodo di trattamento deve essere compatibile con il metodo MS specificato per il campione.</p>	<p>Selezionare un metodo di trattamento dall'elenco di metodi di trattamento nel progetto.</p>

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch (continua)


Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Results File	<p>(File dei risultati) Il nome del file in cui vengono salvati i risultati elaborati. Se è specificato un Results File valido, i dati del campione saranno elaborati automaticamente al termine dell'acquisizione. Se il nome del file non è valido, non è possibile completare il processo di invio del lotto.</p> <hr/> <p>Nota: Se è selezionato un Results File esistente, il metodo integrato per il Results File selezionato viene utilizzato per l'elaborazione e il testo nella cella Processing Method viene sostituito con *Embedded Method*.</p>	<p>Il nome del file non può contenere i seguenti caratteri non validi: \ / ; : * ? " < > =</p> <p>Il percorso del file, inclusi il nome del file e le sottocartelle, deve essere inferiore a 252 caratteri.</p> <hr/> <p>Suggerimento! Fare clic sulla freccia per selezionare un file Results esistente dall'elenco. Per creare un file, digitare il nome del file. Il file sarà creato quando il primo campione nel lotto inviato viene elaborato.</p>
Comment	(Commento) Testo	Deve essere inferiore a 50 caratteri. Il campo Comment non può contenere i seguenti caratteri non validi: \ / : ; * ? " < > =
Custom columns	(Colonne personalizzate) (Opzionale) Colonne definite dall'utente, in formato testo, numero intero o numero reale.	I requisiti dipendono dal formato.
Component Concentrations (Concentrazioni componenti) 		

Tabella 5-5: Colonne dell'area di lavoro Batch (continua)

Nome della colonna	Definizione	Requisiti del valore del campo
Component	<p>(Nome componente) Il nome di un componente definito nel metodo MS, nel metodo di trattamento o nella Results Table.</p> <p>Il lotto può contenere fino a 4.000 righe di componenti.</p>	<p>I nomi dei componenti vengono ricavati dal metodo MS, per le scansioni MRM, dal metodo di trattamento o dalla Results Table. Il nome è convalidato durante la creazione del metodo.</p> <p>È anche possibile aggiungere manualmente componenti alla tabella. Fare riferimento alla sezione: Aggiunta di una concentrazione del componente.</p> <hr/> <p>Nota: se il file di importazione contiene una colonna dati che non corrisponde a nessuna delle colonne nella griglia lotto, allora la colonna è considerata come una colonna nome composto o nome componente. Viene aggiunta una colonna concentrazione che viene popolata con i valori derivanti da questa colonna di dati.</p>
Component concentration	<p>(Concentrazione componente) Concentrazione dell'analita o dello standard interno per i tipi di campione standard e CQ. La tabella contiene una colonna per ogni campione. Il nome del campione viene utilizzato come nome della colonna.</p>	<p>Valore numerico superiore o uguale a zero.</p>

Gestione del lotto

Nota: Verificare che sia stato selezionato il nome del progetto corretto nel pannello dello stato.

Nell'area di lavoro Batch, utilizzare le funzioni seguenti per gestire il lotto.

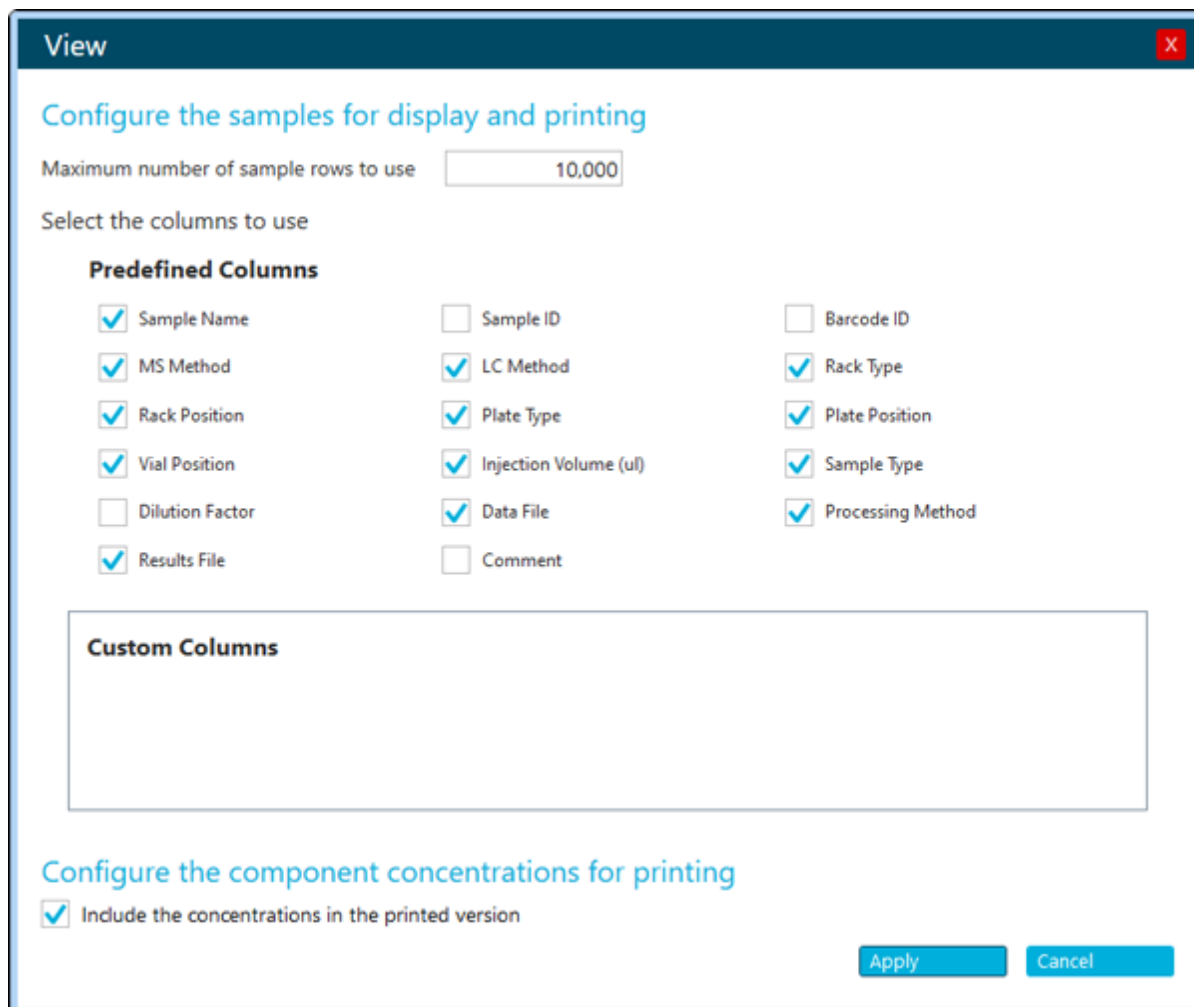
Tabella 5-6: Funzioni dell'area di lavoro Batch

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Mostrare o nascondere colonne	Fare clic su View . Fare riferimento alla sezione: Mostrare o nascondere colonne .
Tagliare le righe	Fare clic su Manage Samples > Cut .
Copiare le righe	Fare clic su Manage Samples > Copy .
Incollare le righe	Fare clic su Manage Samples > Paste .
Inserire una riga	Fare clic su Manage Samples > Insert sample .
Eliminare una riga	Fare clic su Manage Samples > Delete sample .
Selezionare colonne	Fare clic su View . Fare riferimento alla sezione: Mostrare o nascondere colonne .
Aggiungere una sottocartella a un progetto	Fare clic su Manage Samples > Add data sub-folders . Fare riferimento al documento: <i>Guida in linea</i> .
Stampare il lotto	Fare clic su Print .
Salvare il lotto nel progetto corrente	Fare clic su Save > Save o Save > Save As .
Esportare il lotto come file txt o csv	Fare clic su Save > Export .

Mostrare o nascondere colonne

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. Fare clic su **View**.
3. Selezionare o deselezionare le caselle di controllo delle colonne nella finestra di dialogo View secondo necessità. Per le descrizioni colonne, fare riferimento alla tabella: [Tabella 5-5](#).

Figura 5-3: Finestra di dialogo View



4. Fare clic su **OK**.

Aggiunta di una colonna personalizzata

Utilizzare questa procedura per aggiungere colonne al lotto per memorizzare informazioni aggiuntive sul campione, ad esempio peso a secco, affinché possa essere utilizzato nell'elaborazione, ad esempio nelle formule e nelle colonne calcolate.

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. Fare clic con il pulsante destro del mouse nella griglia del lotto, quindi fare clic su **Add Custom Column**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Add Custom Column.
3. Nel campo **Column name** digitare un nome per la colonna.
Il nome deve essere univoco. Non può essere uguale al nome di alcuna colonna predefinita.
4. Nel campo **Column type** selezionare uno di questi tipi:

- **Integer:** la colonna contiene numeri interi. I valori decimali verranno arrotondati al numero intero più vicino.
 - **Real:** la colonna contiene numeri reali, con fino a sei cifre decimali.
 - **Text:** la colonna contiene testo, fino a 128 caratteri.
5. Fare clic su **Add**.
La nuova colonna viene aggiunta a destra dell'area di lavoro Batch.

Modifica del nome di una colonna personalizzata

Nota: **Column type** non può essere modificato.

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. Fare clic con il pulsante destro del mouse nella colonna da modificare, quindi fare clic su **Edit Custom Column**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Edit Custom Column.
3. Nel campo **Name** digitare il nuovo nome per la colonna.
Il nome deve essere univoco. Non può essere uguale al nome di alcuna colonna predefinita.
4. Fare clic su **Apply**.

Rimozione di colonne personalizzate

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. Fare clic con il pulsante destro del mouse nella griglia del lotto, quindi fare clic su **Delete Custom Column**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Delete Custom Column.
3. Selezionare la casella di controllo accanto ai nomi delle colonne da eliminare.
4. Fare clic su **Delete**.

Importazione di un lotto da un file

Procedure preliminari

- Creare un file lotto. Per una descrizione dei campi da includere nel file, fare riferimento alla tabella: [Tabella 5-5](#).

Nota: Nel file Microsoft Excel importato, le colonne predefinite devono precedere le colonne personalizzate. Le intestazioni delle colonne predefinite devono corrispondere ai nomi delle colonne in SCIEX OS. Se le intestazioni delle colonne predefinite non sono corrette, le informazioni non verranno importate. È supportato solo un punto come separatore decimale nei file csv o xsl.

Nota: Chiudere il file lotto prima di importarlo. Non è possibile importare il file lotto se è aperto in Microsoft Excel.

- (Opzionale per l'importazione da Watson LIMS) Per compilare automaticamente il campo **LC Method**, assicurarsi che il nome del metodo LC sia uguale al nome del metodo MS.

Nota: Watson LIMS non include un campo per il metodo LC. Se il nome del metodo LC è diverso dal nome del metodo MS, la colonna del metodo LC deve essere compilata manualmente.

Esaminare il contenuto del lotto prima di inviare i campioni.

Suggerimento! Per accedere ai comandi taglia, copia, incolla, aggiungi righe e rimuovi le funzioni nelle righe, fare clic su **Manage Samples**.

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. (Opzionale) Fare clic su **View** per selezionare le colonne che saranno mostrate nell'area di lavoro Batch.
3. Fare clic su **Open > Import from file**.
Si aprirà la finestra di dialogo Batch Import.
4. Fare clic su **Browse**.
5. Cercare il file richiesto.
6. Fare clic su **Open**.
7. (Opzionale) Selezionare o cancellare la casella di controllo **Append to current batch** come richiesto.

Nota: se l'utente non seleziona l'opzione **Append to current batch**, qualsiasi dato presente nella griglia verrà sovrascritto.

8. Fare clic su **Import**.

9. (Opzionale) Per utilizzare la disposizione piastra come riferimento per selezionare o confermare una posizione del campione, fare clic su **Plate Layout**.
La disposizione piastra fornisce automaticamente le posizioni di pozzetti e fiale per campioni non ancora assegnate.
10. Assicurarsi che la temperatura del forno a colonna sia raggiunta prima di inviare il lotto.
11. Salvare il lotto:
 - a. Fare clic su **Save As**.
Si apre la finestra di dialogo Save As Batch.
 - b. Immettere **File Name** e fare clic su **Save**.
12. Inviare il lotto. Fare riferimento alla sezione: [Inviare un lotto](#).

Importazione di un lotto da LIMS

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Configurare LIMS nell'area di lavoro Configuration. Fare riferimento al documento: <i>Guida in linea</i>.

Nota: Per importare un lotto da un Watson LIMS, fare riferimento alla sezione: [Importazione di un lotto da un file](#).

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. (Opzionale) Fare clic su **View** per selezionare le colonne che saranno mostrate nell'area di lavoro Batch.
3. Fare clic su **Open > Import from LIMS**.
Si aprirà la finestra di dialogo Import a Batch File.
4. Digitare la posizione del file o il nome del file.
5. Immettere l'identificatore di lotto nel campo **Batch Identifier**.
6. (Opzionale) Selezionare o cancellare la casella di controllo **Append to current batch** come richiesto.

Nota: se l'utente non seleziona l'opzione **Append to current batch**, qualsiasi dato presente nella griglia verrà sovrascritto.

7. Fare clic su **Import**.
8. (Opzionale) Per utilizzare la disposizione piastra come riferimento per selezionare o confermare una posizione del campione, fare clic su **Plate Layout**.
La disposizione piastra fornisce automaticamente le posizioni di pozzetti e fiale per campioni non ancora assegnate.
9. (Opzionale) Per includere campioni di calibrazione nel lotto, eseguire la seguente procedura:

Istruzioni operative – Acquisizione

- a. Aprire la finestra di dialogo Batch-Automatic Calibration Editor, fare clic su **Auto-Calibrate**.
 - b. Selezionare le impostazioni di riferimento di ionizzazione e di erogazione del calibrante da applicare automaticamente in base alla frequenza specificata.
 - c. Fare clic su **OK**.
 - d. Selezionare la casella di controllo a sinistra del pulsante **Auto-Calibrate**.
10. Assicurarsi che la temperatura del forno a colonna sia raggiunta prima di inviare il lotto.
11. Salvare il lotto:
- a. Fare clic su **Save As**.
Si apre la finestra di dialogo Save As Batch.
 - b. Immettere **File Name** e fare clic su **Save**.
12. Inviare il lotto. Fare riferimento alla sezione: [Inviare un lotto](#).

Creazione manuale di un lotto

Esaminare il contenuto del lotto prima di inviare i campioni.

Nota: se lo spettrometro di massa utilizza la chiusura a contatto per comunicare con un dispositivo esterno, attenersi alle seguenti linee guida:

- Accertarsi che la sequenza del campione definita nel lotto corrisponda alla sequenza definita sul dispositivo esterno.
- Accertarsi che la durata del metodo sia inferiore o uguale all'intervallo tra le iniezioni, come definito sul dispositivo esterno.

Suggerimento! Per accedere ai comandi taglia, copia, incolla, aggiungi righe e rimuovi le funzioni nelle righe, fare clic su **Manage Samples**.

1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. (Opzionale) Fare clic su **View** per selezionare le colonne che saranno mostrate nell'area di lavoro Batch.

Suggerimento! Per utilizzare un lotto esistente, fare clic su **Open > Open**.

3. Fare clic su **New**.
4. (Opzionale) Per utilizzare la disposizione piastra come riferimento per selezionare o confermare una posizione del campione, fare clic su **Plate Layout**.
La disposizione piastra fornisce automaticamente le posizioni di pozzetti e fiale per campioni non ancora assegnate.
5. Immettere le informazioni sul lotto nella griglia.
Per una descrizione delle colonne nella griglia, fare riferimento alla tabella: [Tabella 5-5](#).

Suggerimento! L'area di lavoro Batch offre le funzioni seguenti per agevolare la creazione di lotti:

- Il contenuto di alcune celle, ad esempio la cella **Sample Type**, può essere selezionato da un elenco nella cella. Fare clic sul lato destro della cella per mostrare l'elenco.
- La seconda riga e quelle successive aggiunte a un lotto si compilano automaticamente con i valori dalla riga precedente.
- L'utente può copiare una cella singola selezionandola, facendo clic nell'angolo in basso a destra della cella e trascinando nell'ultima riga in cui copiare il contenuto della cella.
- L'utente può copiare un gruppo di celle nella stessa riga selezionando le celle, facendo clic nell'angolo in basso della cella più a destra e trascinando nell'ultima riga in cui copiare il contenuto della cella.
- L'utente può copiare una serie di valori digitando valori sequenziali in due righe, selezionando entrambe le celle, facendo clic nell'angolo in basso a destra della cella inferiore e trascinando nell'ultima riga della serie.
- L'utente può utilizzare i comandi Copia (**Ctrl+C**) e Incolla (**Ctrl+V**) per copiare il contenuto di una cella o di un gruppo di celle e incollarlo in una nuova posizione.

Nota: Le colonne LC non sono disponibili finché non viene selezionato un metodo LC.

Suggerimento! Per configurare il lotto per elaborare automaticamente il campione dopo l'acquisizione, utilizzare uno dei metodi seguenti:

- Per utilizzare un metodo di trattamento integrato, selezionare un **Results File** esistente. Il campione sarà elaborato con il metodo integrato del file Results corrispondente.
- Per utilizzare un nuovo metodo di trattamento, cancellare il campo **Results File**. Quando il campo **Results File** è cancellato, il campo **Processing Method** diventa disponibile. Selezionare **Processing Method** e digitare un nuovo nome **Results File**. Il campione sarà elaborato con il metodo di trattamento selezionato.

Per l'elaborazione nel flusso di lavoro di screening non mirato, non è possibile selezionare un campione di confronto per l'elaborazione automatica. Per i metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo AutoPeak, il software crea sempre il modello di integrazione con i campioni utilizzati per creare il metodo.

-
6. (Opzionale) Definire le concentrazioni dei componenti. Fare riferimento alla sezione: [Aggiunta di una concentrazione del componente](#)
 7. (Opzionale) Per applicare le regole di decisione al lotto, attenersi alla seguente procedura:
 - a. Selezionare la casella di controllo **Decision Rules**.

Istruzioni operative – Acquisizione

- b. Fare clic su **Decision Rules** e quindi selezionare **Apply** per ogni regola di decisione da applicare al lotto. Per aggiungere regole di decisione, fare riferimento alla sezione: [Aggiunta di una regola di decisione](#).
- c. Fare clic su **Save**.

Nota: Se viene selezionata l'opzione **Decision Rules** e almeno una regola di decisione è attiva per un lotto, viene visualizzato **Decision Rules: Active** accanto al nome del lotto nell'area di lavoro Queue. Se il progetto attivo si trova nella rete e la rete non è disponibile, viene visualizzato **Decision Rules: Disabled**.

8. Salvare il lotto:
 - a. Fare clic su **Save As**.
Si apre la finestra di dialogo Save As Batch.
 - b. Immettere **File Name** e fare clic su **Save**.
9. Assicurarsi che la temperatura del forno a colonna sia raggiunta prima di inviare il lotto.
10. Assicurarsi che il sistema sia stato equilibrato con il metodo MS e LC usato nel lotto.
11. Inviare il lotto. Fare riferimento alla sezione: [Inviare un lotto](#).

Utilizzo della funzione Plate Layout per creare un lotto

La funzionalità di disposizione della piastra offre una rappresentazione grafica del rack e delle piastre, che può essere utilizzata per riempire la griglia nell'area di lavoro Batch.

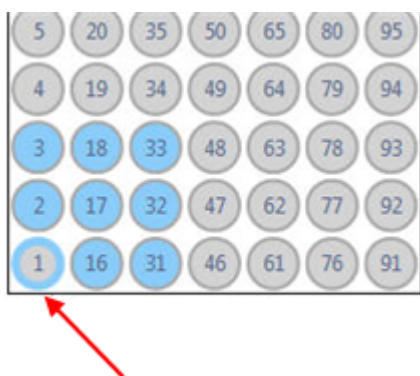
1. Aprire l'area di lavoro Batch.
2. Selezionare un **MS Method**.
3. Selezionare un **LC Method**.
Il sistema LC deve essere attivo.
4. Digitare il nome del **Data File** in cui verranno salvati i dati acquisiti.
5. Selezionare il **Processing Method** che verrà utilizzato per elaborare i dati dopo che vengono acquisiti.
6. Digitare il nome del **Results File** in cui verranno salvati i dati elaborati.
7. Fare clic su **Plate Layout**.
Si apre la finestra Plate Layout e, per impostazione predefinita, mostra una rappresentazione grafica della piastra.
8. Impostare le proprietà della piastra.
La finestra si aggiorna e mostra una rappresentazione grafica del tipo di piastra selezionato.
9. Fare clic su una posizione del campione sulla rappresentazione grafica.
La posizione del campione selezionata viene evidenziata interamente nella rappresentazione grafica. L'area di lavoro Batch viene aggiornata partendo dalla prima riga in cui la posizione del campione non è definita completamente, cioè una riga che non comprende **Rack Type**, **Plate Type**, se sono utilizzati pozzetti, e i valori **Vial Position**. La griglia mostra le posizioni dei campioni di conseguenza.

- Continuare a selezionare le posizioni dei campioni secondo quanto indicato nella rappresentazione grafica per riempire la griglia nell'area di lavoro Batch.
Se le posizioni dei campioni vengono indicate nella griglia dell'area di lavoro Batch, la rappresentazione grafica viene aggiornata di conseguenza.

Suggerimento! Per rimuovere tutti i dati associati a uno specifico tipo di rack, fare clic su **Clear All**. Se il tipo di rack selezionato identifica una piastra, allora il menu sotto **Clear All** comprenderà **Clear Front** e **Clear Back**.

- Per specificare una posizione del campione selezionata ripetuta, fare clic sulla posizione del campione nella rappresentazione grafica.
La rappresentazione grafica della disposizione della piastra mostra la posizione del campione ripetuto con un bordo colorato, e la griglia nell'area di lavoro Batch mostra i dati conformemente alla rappresentazione.

Figura 5-4: Disposizione della piastra-Posizione del campione ripetuta (Posizione 1)



Nota: Le posizioni non selezionate sono mostrate in grigio e le posizioni selezionate una volta sono mostrate in blu con un bordo grigio.

- Per consultare l'indice dei campioni nella rappresentazione grafica, posizionare il cursore sulla posizione del campione evidenziata.
Un suggerimento mostra l'indice dei campioni.
- Dopo aver assegnato e rivisto tutte le posizioni vengono, fare clic su **Close** nella finestra Plate Layout e quindi clic su **Save** nell'area di lavoro Batch.

Creazione di una tabella di riferimento di ionizzazione

- Aprire l'area di lavoro Batch.
- Fare clic su **Auto-Calibrate**.
Si apre la finestra di dialogo Batch - Automatic Calibration Editor.
- Fare clic su **Edit**.
Fare clic per aprire la finestra di dialogo Ion Reference Table Editor.
- Fare clic su **New**.

Istruzioni operative – Acquisizione

Suggerimento! Utilizzare il tasto Tab per passare da una cella all'altra e premere Enter (Invio) per aggiungere una riga.

5. Nella griglia **Reference Ions for TOF MS Calibration**, immettere una massa precursore.
Il campo **Compound Name** è opzionale.
 6. Aggiungere righe secondo necessità.
 7. Nella colonna **Use**, selezionare gli ioni da utilizzare.
 8. Selezionare il pulsante di opzione **Use for MS/MS** per la massa precursore da utilizzare per la MS/MS.
 9. Immettere dei valori nei campi **CE for MS/MS** e **DP for MS/MS** per la massa precursore selezionata al punto 8.
 10. Nella griglia **Reference Ions for MS/MS Calibration**, aggiungere e selezionare almeno due masse di frammenti.
Il campo **Fragment Name** è opzionale.
 11. Fare clic su **OK**.
 12. Immettere un nome nel campo Save Reference Table, quindi fare clic su **OK**.
-

Nota: se l'utente seleziona un Metodo LC come modalità di erogazione del calibrante, allora bisognerà specificare il Retention Time e Retention Time Tolerance nella tabella Reference Ions.

Calibrazione del sistema usando il CDS

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con l'opzione di chiusura a contatto, fare riferimento alla sezione: [Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto](#).

1. Aprire l'area di lavoro **Batch**.
 2. Fare clic su **Auto-Calibrate**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Batch - Automatic Calibration Editor.
 3. Selezionare una tabella Ion Reference.
-

Nota: Per i metodi TOF MSMS, assicurarsi che la massa precursore selezionata nella tabella di riferimento sia maggiore della massa precursore più piccola nel metodo.

4. Inserire il numero di campioni da acquisire tra le calibrazioni.
 5. Selezionare **CDS** come modalità di erogazione del calibrante.
Di default, è selezionato il canale 1 del CDS. Usare il canale 1 per le soluzioni positive e il canale 2 per le soluzioni negative.
 6. Fare clic su **OK** per chiudere la finestra di dialogo.
 7. Assicurarsi che sia selezionata la casella di controllo a sinistra di **Auto-Calibrate**.
 8. Creare e inviare un lotto.
-

Calibrazione del sistema utilizzando un metodo LC

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con l'opzione di chiusura a contatto, fare riferimento alla sezione: [Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto](#).


1. Aprire l'area di lavoro **Batch**.
2. Fare clic su **Auto-Calibrate**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Batch - Automatic Calibration Editor.
3. Selezionare una tabella Ion Reference.
4. Inserire il numero di campioni da acquisire tra le calibrazioni.
5. Selezionare un metodo LC come modalità di erogazione del calibrante.
Sulla destra della finestra di dialogo compariranno i campi del rack, della piastra e delle fiale dell'autocampionatore ed anche il campo del metodo MS.
6. Selezionare un metodo MS e poi selezionare i relativi dati su rack, piastra e fiale.
7. Fare clic su **OK** per chiudere la finestra di dialogo.
8. Assicurarsi che sia selezionata la casella di controllo a sinistra di **Auto-Calibrate**.
9. Creare e inviare un lotto.

Gestione delle concentrazioni dei componenti

Aggiunta di una concentrazione del componente


Il lotto contiene le concentrazioni dei componenti definite nel metodo MS, nel metodo di trattamento o nella Results Table. Utilizzare questa procedura per aggiungere ulteriori concentrazioni dei componenti.

Nota: Le concentrazioni dei componenti aggiunte utilizzando questa procedura sono modificabili per i campioni di tipo QualityControl e Standard. Le concentrazioni dei componenti vengono anche aggiunte a un lotto quando per un campione si definisce un metodo di trattamento che contiene dei componenti. Le concentrazioni dei componenti aggiunte dal metodo di trattamento sono modificabili solo per i campioni con metodi di trattamento che contengono il componente.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Component Concentrations** ()
2. Fare clic su **Manage Components > Add Component**.
3. Digitare il nome di **Component**.
4. Fare clic su **OK**.
La nuova concentrazione componente viene aggiunta al lotto corrente.

Eliminazione di una concentrazione componente

Utilizzare questa procedura per rimuovere una concentrazione componente dal lotto.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Component Concentrations** ()

2. Fare clic su **Manage Components > Remove Component**.
Viene visualizzato un elenco dei componenti. Contiene tutti componenti aggiunti con il comando **Add Component Concentration**, o quando al lotto è stato aggiunto un metodo MRM o un metodo di trattamento.
3. Selezionare il componente dall'elenco.
4. Fare clic su **OK**.

Gestione delle regole di decisione

Aggiunta di una regola di decisione

Utilizzare questa procedura per aggiungere una regola di decisione.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic su **Add Rule**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rule Configuration.
3. Inserire un nome per la regola di decisione.
4. Definire le proprietà per la regola di decisione, tra cui la regola di segnalazione, quando la regola di decisione verrà valutata e la risposta. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. Fare clic su **Save** per salvare la regola di decisione.
6. Fare clic su **Save** per chiudere la finestra di dialogo.

Nota: Se l'utente non fa clic su **Save** nella finestra di dialogo Decision Rules, la nuova regola di decisione non verrà salvata.

Modifica di una regola di decisione

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic sul **Decision Rule Name** della regola di decisione da modificare.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rule Configuration.
3. Modificare il **Decision rule name** e le impostazioni per la regola di decisione, tra cui la regola di segnalazione, quando la regola di decisione verrà valutata e la risposta. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
4. Fare clic su **Save** per salvare la regola di decisione.
5. Fare clic su **Save** per chiudere la finestra di dialogo.

Nota: Se l'utente non fa clic su **Save** nella finestra di dialogo Decision Rules, la nuova regola di decisione non verrà salvata.

Eliminazione di una regola di decisione

Utilizzare questa procedura per eliminare una regola di decisione.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic sul link **Flagging Rule Used**.
3. Fare clic su **Delete Rule** per eliminare la regola di decisione.
4. Fare clic su **Save**.

Creazione di una regola duplicata

Attenersi a questa procedura per creare una regola duplicata.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic sulla regola di decisione da modificare.
3. Fare clic su **Duplicate Rule**.
4. Fare clic su **Save**.

Importazione delle regole di decisione

Utilizzare questa procedura per importare le regole di decisione.

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic su **Import List**.
3. Spostarsi sul file di testo da importare e selezionarlo, quindi fare clic su **Open**.
4. Fare clic su **Save**.

Esportazione delle regole di decisione

1. Nell'area di lavoro Batch, fare clic su **Decision Rules**.
Viene aperta la finestra di dialogo Decision Rules.
2. Fare clic su **Export List**.
3. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il file di testo, inserire un nome file e fare clic su **Save**.
4. Fare clic su **Cancel**.

Equilibratura del sistema

Equilibrare il sistema all'inizio della giornata, prima di eseguire un nuovo metodo o prima di inviare un lotto. L'equilibratura riscalda e prepara lo spettrometro di massa e il sistema LC per il successivo campione o lotto.

1. Fare clic su **Equilibrate** nel pannello di stato.
Si aprirà la finestra di dialogo Equilibrate.
2. Selezionare un metodo MS dall'elenco **MS Method**.
3. Selezionare un metodo LC dall'elenco **LC Method**.

Istruzioni operative – Acquisizione

4. Inserire il tempo di equilibratura nel campo **Time (min)**, in minuti.
5. Fare clic su **OK**.
Al termine dell'equilibratura, lo stato del sistema nel pannello di stato è Ready.

Suggerimento! Aprire l'area di lavoro Queue per monitorare l'avanzamento dell'equilibratura. L'area di lavoro Queue indica quanto tempo è necessario per il completamento dell'equilibratura. Per interrompere l'equilibratura prima del termine, fare clic su **Stop** nell'area di lavoro Queue.

Inviare un lotto

Procedure preliminari

- [Equilibratura del sistema](#).
- Aprire un lotto nell'area di lavoro Batch.

1. Fare clic su **Submit**.
Viene aperta la finestra di dialogo Submit Samples.
2. Fare clic su **OK** per continuare.

Nota: se l'opzione **Auto-Calibrate** è selezionata e lo spettrometro di massa è configurato con l'opzione di chiusura a contatto, la prima esecuzione della calibrazione viene eseguita automaticamente. Quindi, il sistema passa in stato di caricamento fino a quando l'utente avvia un'iniezione sul dispositivo esterno.

Se nella parte superiore della schermata vengono visualizzati errori, risolverli e fare nuovamente clic su **Submit**. Il lotto viene aggiunto alla coda finché non sono stati risolti tutti gli errori.

Suggerimento! Se la coda non è iniziata, individuare l'area di lavoro Queue e fare clic su **Start** sulla barra dei menu.

Invio di un campione singolo alla coda dall'area di lavoro Batch

Procedure preliminari

- [Equilibratura del sistema](#).
- Aprire un lotto nell'area di lavoro Batch.

1. Selezionare il numero di indice della riga del campione.
2. Fare clic su **Submit**.
Viene aperta la finestra di dialogo Submit Samples.
3. Fare clic su **OK** per continuare.

Nota: se l'opzione **Auto-Calibrate** è selezionata e lo spettrometro di massa è configurato con l'opzione di chiusura a contatto, la prima esecuzione della calibrazione viene eseguita automaticamente. Quindi, il sistema passa in stato di caricamento fino a quando l'utente avvia un'iniezione sul dispositivo esterno.

Se nella parte superiore della schermata vengono visualizzati errori, risolverli e fare nuovamente clic su **Submit**. Il lotto viene aggiunto alla coda finché non sono stati risolti tutti gli errori.

Suggerimento! Se la coda non è iniziata, individuare l'area di lavoro Queue e fare clic su **Start** sulla barra dei menu.

Invio di più campioni alla coda dall'area di lavoro Batch

Procedure preliminari

- [Equilibratura del sistema.](#)
- Aprire un lotto nell'area di lavoro Batch.

1. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Premere **Ctrl** mentre si fa clic sul numero di indice della riga di campione di ogni campione.
 - Trascinare verso l'alto o verso il basso l'elenco dei numeri di indice.

Nota: i campioni sono inviati nell'ordine in cui sono stati selezionati e non nell'ordine in cui sono visualizzati nel lotto.

2. Fare clic su **Submit**.
Viene aperta la finestra di dialogo Submit Samples.
3. Fare clic su **OK** per continuare.

Nota: se l'opzione **Auto-Calibrate** è selezionata e lo spettrometro di massa è configurato con l'opzione di chiusura a contatto, la prima esecuzione della calibrazione viene eseguita automaticamente. Quindi, il sistema passa in stato di caricamento fino a quando l'utente avvia un'iniezione sul dispositivo esterno.

Se nella parte superiore della schermata vengono visualizzati errori, risolverli e fare nuovamente clic su **Submit**. Il lotto viene aggiunto alla coda finché non sono stati risolti tutti gli errori.

Suggerimento! Se la coda non è iniziata, individuare l'area di lavoro Queue e fare clic su **Start** sulla barra dei menu.

Area di lavoro Queue

L'area di lavoro Queue mostra:

Istruzioni operative – Acquisizione

- Stato della coda
- Stato del lotto
- Stato di acquisizione ed elaborazione del campione

In questa area di lavoro, l'utente può gestire lotti e campioni nella coda.

Per impostazione predefinita, i campioni non vengono mostrati nella coda. Le informazioni sui campioni vengono compresse sotto il nome del lotto. Vengono mostrati lo stato e il nome del lotto, il numero di campioni presenti nel lotto e il tempo rimanente per acquisire il lotto attuale. Il campione di calibrazione incluso nel lotto è mostrato come Cal nella coda nella colonna Sample Name.

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Nota: Non cambiare manualmente la posizione della valvola deviatrice integrata durante l'acquisizione del campione.

Figura 5-5: Area di lavoro Queue

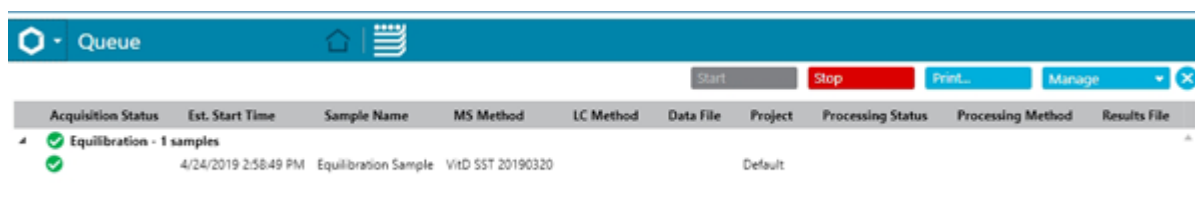


Tabella 5-7: Colonne dell'area di lavoro Queue

Etichetta	Descrizione
<i>Batch Name</i>	Il nome del lotto inviato alla coda, il numero di campioni nel lotto e lo stato di elaborazione della regola di decisione. La coda contiene una riga per ogni lotto. Per impostazione predefinita il lotto viene compresso, ma può essere espanso per mostrare tutti i campioni che contiene. Per ogni campione, vengono visualizzate informazioni nelle colonne seguenti. Nota: Per i lotti con elaborazione di regole di decisione, il software ritarda l'acquisizione del campione successivo per consentire il completamento dell'elaborazione del campione corrente. Se l'elaborazione non viene completata entro il tempo consentito, le regole di decisione vengono disabilitate. Il tempo di ritardo è pari a 1,5 volte il tempo di acquisizione.
Acquisition Status	(Stato acquisizione) Stato di acquisizione dei dati Per informazioni sulle icone di stato, fare riferimento alla sezione: Icane della coda .
Est. Start Time	(Ora di inizio est.) Ora di inizio dell'acquisizione del campione.
Acquisition Time	(Durata acquisizione) Durata dell'acquisizione del campione.

Tabella 5-7: Colonne dell'area di lavoro Queue (continua)

Etichetta	Descrizione
Sample Name	(Nome campione) Nome del campione, come specificato nel lotto.
Sample ID	(ID campione) Identificatore del campione, come specificato nel lotto.
Barcode	(Codice a barre) Numero del codice a barre della fiala del campione, come specificato nel lotto.
Rack Code	(Codice rack) Identificatore per il rack LC, come specificato nel lotto.
Rack Position	(Posizione rack) Posizione di installazione del rack LC, come specificato nel lotto.
Plate Code	(Codice piastra) Identificatore della piastra LC, come specificato nel lotto.
Plate Position	(Posizione piastra) Posizione di installazione della piastra LC, come specificato nel lotto.
Vial Position	(Posizione fiala) Posizione del campione nella piastra o rack LC.
MS Method	(Metodo MS) Metodo MS, come specificato nel lotto.
LC Method	(Metodo LC) Metodo LC, come specificato nel lotto.
Injection Volume	(Volume iniezione) Quantità di campione iniettato.
Data File	(File di dati) Nome del file di dati dal quale saranno acquisiti i dati.
Scanned Barcode	(Codice a barre scansionato) Identificatore per la fiala.
User	(Utente) Nome dell'utente che ha inviato il lotto.
Project	(Progetto) Progetto in cui sarà salvato il file di dati.
Data File Status	(Stato file di dati) Stato del file di dati
Auto Processing Status	(Stato elaborazione automatica) Lo stato di elaborazione dei dati. Per informazioni sulle icone di stato, fare riferimento alla sezione: Icane della coda .
Processing Method	(Metodo di trattamento) Metodo di trattamento che sarà utilizzato per elaborare i dati acquisiti. Se si utilizza un file Results esistente, questa colonna contiene il testo <i>*Embedded Method*</i> .
Results File	(File di risultati) File in cui saranno scritti i dati elaborati.
Decision Rule Status	(Stato regola di decisione) Lo stato di segnalazione di un campione e l'azione intrapresa dalla regola di decisione.
Decision Rule Summary	(Riepilogo regola di decisione) Il nome della regola di decisione attivata.

Gestione della coda

L'acquisizione inizia dopo che i campioni sono stati inviati dall'area di lavoro Batch (Lotto). Prima di inviare un lotto, assicurarsi che il sistema sia equilibrato. Fare riferimento alla sezione: [Equilibratura del sistema](#).

Nota: Eseguire nuovamente il campione se si verifica un'interruzione anomala durante l'acquisizione del campione. Se l'interruzione anomala è dovuta a una mancanza di corrente, la temperatura del vassoio dell'autocampionatore non viene mantenuta e l'integrità del campione potrebbe risultare compromessa.

Utilizzare le funzioni nella tabella seguente per gestire i campioni e i lotti nella coda.

Tabella 5-8: Funzioni dell'area di lavoro Queue



Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Mostrare o nascondere colonne.	Fare clic su Manage > Display Columns . Fare riferimento alla sezione: Mostrare o nascondere colonne .
Visualizzare tutti i campioni nel lotto.	Fare clic su  .
Comprimere tutti i campioni nel lotto.	Fare clic su  .
Avviare l'acquisizione.	Fare clic su Start . Equilibrare il sistema prima di eseguire qualsiasi campione.
Visualizzare lo stato dei campioni inviati.	Fare doppio clic sull'intestazione del lotto.
Riacquisire i campioni selezionati.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic sui campioni.2. Fare clic su Manage > Reacquire samples.
Eliminare i campioni selezionati.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic sui campioni.2. Fare clic su Manage > Delete samples.
Eliminare tutti i campioni sotto il campione selezionato.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic sul campione.2. Fare clic su Manage > Delete samples below row selection.
Cancellare la coda di tutti i lotti o campioni acquisiti.	Fare clic su Manage > Clear queue .
Rimuovere l'evidenziazione da una riga selezionata.	Fare clic su Manage > Clear all selections .

Tabella 5-8: Funzioni dell'area di lavoro Queue (continua)




Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Spostare il lotto o il campione selezionato in cima alla coda.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Fare clic sull'intestazione del lotto. 2. Fare clic su Manage > Move row to top. <hr/> <p>Nota: è possibile spostare solo singoli lotti o campioni che non sono stati acquisiti.</p>
Spostare in alto il campione selezionato nella coda.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Fare clic sul campione. 2. Fare clic su Manage > Move row up. <hr/> <p>Nota: Solo singoli campioni che non sono stati acquisiti possono essere spostati.</p>
Spostare in basso il campione selezionato nella coda.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Fare clic sul campione. 2. Fare clic su Manage > Move row down. <hr/> <p>Nota: Solo singoli campioni che non sono stati acquisiti possono essere spostati.</p>
Comprimere tutti i campioni e tutti i lotti.	Fare clic su Manage > Collapse all rows.
Visualizzare tutti i campioni e tutti i lotti.	Fare clic su Manage > Expand all rows.
Visualizzare i dati da un campione in corso di acquisizione.	<p>Eseguire una delle seguenti operazioni:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Fare doppio clic sul campione in corso di acquisizione. <hr/> <p>Nota: Fare doppio clic su una delle colonne a sinistra della colonna Processing Status.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> • Fare clic su Open data exploration to view real time data () nel pannello Data Acquisition.
Visualizzare i dati di un campione che è stato acquisito.	Fare doppio clic sul segno di spunta verde () nella colonna Acquisition Status.
Visualizzare il file dei risultati creato.	Fare doppio clic sul segno di spunta verde () nella colonna Processing Status.

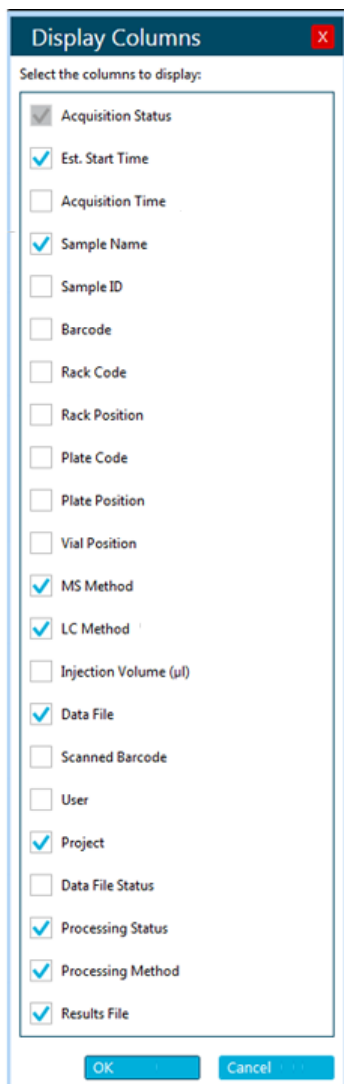
Tabella 5-8: Funzioni dell'area di lavoro Queue (continua)

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Visualizzare le provette con codice a barre che sono in fase di lettura.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic su Manage > Display Columns.2. Selezionare la casella di controllo Barcode o Scanned Barcode o entrambe nella finestra di dialogo Select Columns. Fare riferimento alla sezione: Mostrare o nascondere colonne.3. Fare clic su OK.
Arrestare la coda.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic su Stop.2. Selezionare Stop now o Stop after the current tasks are completed.3. Fare clic su OK.
Arrestare l'elaborazione di tutti i campioni in coda restanti.	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic su Cancel remaining processing.2. Fare clic su Yes.
Stampare la coda.	Fare clic su Print dal menu dell'area di lavoro.

Mostrare o nascondere colonne

1. Nell'area di lavoro Queue, fare clic su **Manage > Display Columns**.
2. Selezionare o deselezionare le caselle di controllo delle colonne nella finestra di dialogo Display Columns, secondo necessità. Per le descrizioni colonne, fare riferimento alla tabella: [Tabella 5-7](#).

Figura 5-6: Finestra di dialogo Display Columns



3. Fare clic su **OK**.

Icone della coda

Tabella 5-9: Icone della coda

Icona	Nome	Descrizione
▶	Freccia espandi	Mostra i campioni nel lotto.
◀	Freccia comprimi	Nasconde i campioni nel lotto.

Tabella 5-10: Icone stato di acquisizione












Icona ¹	Nome	Descrizione
	Completed	Il campione o l'intero lotto è stato acquisito correttamente. Fare doppio clic su questa icona per aprire il campione nell'area di lavoro Explorer.
	Warning	Il campione è stato acquisito, ma l'utente ha interrotto o esteso l'acquisizione.
	Failed	Il campione o qualsiasi campione all'interno del lotto non è stato acquisito correttamente.
	Failed	Il campione di calibrazione non soddisfa i criteri di accettazione. Fare doppio clic sull'icona per visualizzare il report sullo stato.
	In Progress	Il campione o il lotto sono in corso di acquisizione.
	Waiting	Il campione o il lotto non sono ancora stati acquisiti o non sono in corso di acquisizione.
	Barcode Warning	Si è verificato un errore durante la lettura del codice a barre o una mancata corrispondenza tra la scansione del codice a barre e il campione.

Tabella 5-11: Icone stato di elaborazione

Icona ²	Nome	Descrizione
	Completed	Il campione è stato elaborato correttamente. Fare doppio clic su questa icona per aprire il file Results nell'area di lavoro Analytics.
	Warning	L'elaborazione è stata interrotta dall'utente.
	Failed	Il campione non è stato elaborato correttamente.
	In Progress	Il campione è in fase di elaborazione.

¹ Se vengono utilizzate regole di decisione, lo stato dell'acquisizione può essere influenzato dalla regola di decisione. Ad esempio, è possibile che la regola di decisione annulli un campione o interrompa la coda. La regola di decisione tiene conto di tutti i campioni nel lotto e, se i campioni vengono elaborati in file Results diversi, dei rispettivi file Results associati. Vengono tenuti in considerazione anche i campioni non più visibili nella coda.

² Se la colonna **Processing Status** è vuota, non è stato selezionato un metodo di trattamento o un file Results per il campione.

Tabella 5-11: Icone stato di elaborazione (continua)


Icona	Nome	Descrizione
	Waiting	Il campione non è ancora stato elaborato.

Tabella 5-12: Icone di stato delle regole di decisione









Icona ^{3 4}	Nome	Descrizione
	Flagging rule passed	Il campione soddisfa i criteri di superamento della regola di segnalazione configurata nella regola di decisione.
	Flagging rule marginal	Il campione soddisfa i criteri marginali della regola di segnalazione configurata nella regola di decisione.
	Flagging rule failed	Il campione soddisfa i criteri di non superamento della regola di segnalazione configurata nella regola di decisione.
	Queue stopped	La coda viene interrotta in base a una regola di decisione. Questa icona viene anche visualizzata quando la coda viene interrotta e viene acquisito il lotto successivo.
	Sample injected	Il campione viene iniettato nuovamente in base a una regola di decisione oppure viene iniettato il campione da una fiala configurata nella regola decisione.

Tabella 5-13: Icone stato del file di dati

Icona	Nome	Descrizione
	Transfer Complete	Il campione è stato trasferito correttamente nel progetto di rete.
	Transfer in Process	È in corso il trasferimento del campione nel progetto di rete.
	Transfer Failed	Il trasferimento del campione non è riuscito. SCIEX OS proverà a trasferire nuovamente il campione.

³ Le icone di stato di segnalazione e le loro descrizioni comandi vengono visualizzate quando l'utente posiziona il cursore del mouse sul nome di una regola di decisione, sul nome di una regola di segnalazione e sull'azione intrapresa.

⁴ Se l'utente seleziona di valutare la regola dopo che tutti gli standard sono stati acquisiti, gli stati dei campioni segnalati vengono aggiornati in modo retroattivo.

Area di lavoro MS Tune

Un file dat è creato dal software quando i dati dello strumento sono salvati. Utilizzare questo file per ripristinare stati di parametri precedenti. Il file di backup dat è denominato utilizzando l'ora in cui è stato creato il file e non l'ora del backup.

Nota: quando viene utilizzata la sonda APCI, sono disponibili solo le funzioni Quick Status Check e Advanced Troubleshooting. Per eseguire altre procedure di ottimizzazione, installare la sonda ESI.

Ogni volta che viene caricata la procedura di tuning MS, viene effettuato il backup di tutti i parametri dello spettrometro di massa.

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Eseguire una verifica rapida dello stato

Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Assicurarsi che sia installata la provetta giusta. |
|--|

Utilizzare questa procedura per calibrare il sistema e verificare rapidamente la risoluzione nelle modalità TOF MS e MS/MS. Se l'accuratezza della massa di allineamento dei canali non soddisfa le specifiche, è possibile ripetere la procedura e calibrare il sistema. Se la risoluzione non soddisfa le specifiche, è possibile eseguire la procedura di tuning TOF per ottimizzare il sistema.

Suggerimento! È possibile accedere a questa procedura facendo clic sull'opzione **MS Check** nel pannello di stato.

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con un CDS, il software avvia automaticamente il CDS all'inizio del passaggio Achieve Stable Spray. Il software arresta il CDS quando l'utente chiude l'area di lavoro MS Tune.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **Positive Quick Status Check** o **Negative Quick Status Check** dall'elenco **Tuning Procedures**.
3. Fare clic su **Next**.
4. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. (Opzionale) Revisionare il report per verificare i risultati di ciascuna fase.
6. (Opzionale) Salvare il report.
7. Fare clic su **Save Tuning Settings** se i risultati sono soddisfacenti. In caso contrario, procedere in uno dei seguenti modi:

- Ripetere la procedura.
- Eseguire la procedura di tuning TOF MS. Fare riferimento alla sezione: [Tuning TOF](#).
- Ignorare i risultati chiudendo l'area di lavoro **MS Tune**.
- Ripristinare le impostazioni precedenti selezionando il file di backup corretto nel menu **Restore Instrument Data**.

Ottimizzazione del rilevatore

Quando la sensibilità del sistema è bassa, utilizzare questa procedura per verificare che la tensione del rilevatore sia ottimizzata. Durante la procedura, il software può regolare la tensione del rilevatore per fornire la sensibilità ottimale. Al completamento dell'ottimizzazione è possibile salvare i valori ottimizzati o ignorare le modifiche.

Nota: Accertarsi di eseguire questa procedura in entrambe le modalità High Mass e Low Mass.

Si consiglia di ottimizzare il rilevatore una volta al mese. Il rilevatore deve essere ottimizzato anche nel caso in cui si verifichi una significativa diminuzione della sensibilità e dopo l'evacuazione e la pulizia dello strumento.

Nota: l'obsolescenza del rilevatore dipende dall'esposizione agli ioni; potrebbe pertanto essere necessaria un'ottimizzazione più frequente qualora si utilizzino campioni molto concentrati.

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con un CDS, il software avvia automaticamente il CDS all'inizio del passaggio Achieve Stable Spray. Il software arresta il CDS quando l'utente chiude l'area di lavoro MS Tune.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Dall'elenco **Tuning Procedures**, procedere come segue:
 - (Sistemi ZenoTOF) Selezionare **Positive Detector Optimization** o **Negative Detector Optimization**.
 - (Sistemi X500 QTOF) Selezionare **Detector Optimization**.

Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo del processo di ottimizzazione, eventuali prerequisiti e fornisce istruzioni.

3. Accertarsi che la pompa a siringa sia configurata correttamente. Fare riferimento al documento: *Guida per l'utente del sistema*. Quindi fare clic su **Next**.
4. Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile, quindi fare clic su **Next**.
5. Seguire le istruzioni sullo schermo. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*. Viene visualizzato il rapporto di ottimizzazione.
6. (Opzionale) Salvare il report attenendosi alla seguente procedura:
 - a. Nella pagina Report, fare clic su **Save report as..**

Istruzioni operative – Acquisizione

- b. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il report, digitare un **File name**, quindi fare clic su **Save**.
7. Fare clic su **Next**.
8. Fare clic su **Save Settings**.

Nota: Se il rivelatore viene ottimizzato a 2.650 V o a un valore superiore, contattare sciex.com/request-support per la sostituzione del rivelatore.

Viene visualizzato il messaggio seguente: "Tuning settings were saved".

Tuning dell'unità Q1

Negli esperimenti MS/MS, la regione Q1 viene utilizzata per selezionare uno ione precursore per la frammentazione. Il tuning dell'unità Q1 consente di ottimizzare la larghezza dei picchi e di calibrare la massa Q1. L'unità Q1 rappresenta la larghezza della finestra di selezione degli ioni precursori alla risoluzione dell'unità. Q1 Low o Q1 Open rappresenta la larghezza della finestra di selezione degli ioni precursori a una risoluzione bassa (finestra più ampia) o aperta (finestra aperta). Dopo il tuning dell'unità Q1, le impostazioni bassa e aperta vengono calcolate sulla base dei valori dell'unità Q1.

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con un CDS, il software avvia automaticamente il CDS all'inizio del passaggio Achieve Stable Spray. Il software arresta il CDS quando l'utente chiude l'area di lavoro MS Tune.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **Positive Q1 Unit Tuning** o **Negative Q1 Unit Tuning** dall'elenco **Tuning Procedures**.
3. Fare clic su **Next**.
4. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. (Opzionale) Fare clic su **Edit Method** per regolare i parametri.
6. Se è stata effettuata la calibrazione, fare clic su **Confirm** per eseguire un'acquisizione di conferma.
7. Fare clic su **Next**.
8. (Opzionale) Salvare il report.
9. Fare clic su **Next**.
10. Fare clic su **Save Settings**.

Tuning TOF

La procedura di tuning TOF MS consente di ottimizzare i parametri per la risoluzione e la sensibilità nelle modalità TOF MS e MS/MS. L'ottimizzazione inizia con la verifica delle prestazioni del sistema prima del tuning e prosegue con l'aumento graduale di diversi parametri per ottenere l'intensità e la risoluzione massime. Dopo l'allineamento dei canali,

il sistema viene calibrato e le sue prestazioni vengono determinate. Se le prestazioni sono soddisfacenti, sarà possibile salvare le impostazioni di tuning nel sistema oppure ignorarle.

È possibile eseguire il tuning TOF MS in modalità automatica o manuale. Nella modalità manuale, gli utenti possono selezionare i valori dei parametri ottimizzati o fare una pausa al termine della procedura di tuning.

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con un CDS, il software avvia automaticamente il CDS all'inizio del passaggio Achieve Stable Spray. Il software arresta il CDS quando l'utente chiude l'area di lavoro MS Tune.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Dall'elenco **Tuning Procedures**, procedere come segue:
 - (Sistemi X500 QTOF) Selezionare **Positive TOF MS Tuning** o **Negative TOF MS Tuning**.
 - (Sistemi ZenoTOF) Selezionare **Positive TOF Tuning** o **Negative TOF Tuning**.
3. Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile.
4. Fare clic su **Next**.
5. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
6. Fare clic su **Next**.
7. (Opzionale) Salvare il report.
8. Fare clic su **Save Settings** se i risultati sono soddisfacenti. In caso contrario, procedere in uno dei seguenti modi:
 - Ripetere la procedura.
 - Ignorare i risultati chiudendo l'area di lavoro **MS Tune**.
 - Ripristinare le impostazioni precedenti selezionando il file di backup corretto nel menu **Restore Instrument Data**.
 - Contattare sciex.com/request-support.

Tuning dell'unità Q1 alta

Negli esperimenti MS/MS, la regione Q1 viene utilizzata per selezionare uno ione precursore per la frammentazione. Il tuning dell'unità Q1 alta ottimizza la larghezza di picco e calibra la massa Q1. L'unità Q1 alta rappresenta una finestra di selezione degli ioni precursore più stretta.

Nota: Se lo spettrometro di massa è configurato con un CDS, il software avvia automaticamente il CDS all'inizio del passaggio Achieve Stable Spray. Il software arresta il CDS quando l'utente chiude l'area di lavoro MS Tune.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.

Istruzioni operative – Acquisizione

2. Selezionare **Positive Q1 High Tuning** o **Negative Q1 High Tuning** dall'elenco **Tuning Procedures**.

Nota: Se la procedura Q1 alta positiva non è stata eseguita per un determinato periodo di tempo, fare clic su **Copy** per utilizzare le impostazioni Positive Q1 Unit come punto di inizio.

3. Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile.
4. Fare clic su **Next**.
5. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
6. (Opzionale) Fare clic su **Edit Method** per regolare i parametri.
7. Se è stata effettuata la calibrazione, fare clic su **Confirm** per eseguire un'acquisizione di conferma.
8. Fare clic su **Next**.
9. (Opzionale) Salvare il report.
10. Fare clic su **Next**.
11. Fare clic su **Save Settings**.

Calibrazione Zeno (sistemi ZenoTOF)

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **Positive Zeno Calibration** o **Negative Zeno Calibration** dall'elenco **Tuning Procedures**.
Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo e i prerequisiti del processo di calibrazione.
3. Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile, quindi fare clic su **Next**.

Nota: L'utente può regolare manualmente i **Source and Gas Parameters** nella pagina Achieve Stable Spray/Modify.

4. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. Fare clic su **Next**.
6. (Opzionale) Salvare il report attenendosi alla seguente procedura:
 - a. Nella pagina Report, fare clic su **Save report as..**
 - b. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il report, digitare un **File name**, quindi fare clic su **Save**.
7. Fare clic su **Next**.
8. Fare clic su **Save Tuning Settings** se i risultati sono soddisfacenti. In caso contrario, procedere in uno dei seguenti modi:

- Ripetere la procedura.
- Ignorare i risultati chiudendo l'area di lavoro **MS Tune**.
- Ripristinare le impostazioni precedenti selezionando il file di backup corretto nel menu **Restore Instrument Data**.

Esecuzione dell'ottimizzazione EAD (sistemi ZenoTOF)

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **EAD Optimization** dall'elenco **Tuning Procedures**. Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo e i prerequisiti del processo di ottimizzazione.
3. Selezionare il **Tuning process** e fare clic su **Next**.
4. Nella pagina Filament Calibration Verification selezionare **Filament**, quindi fare clic su **Calibrate Filament**.

Suggerimento! Per modificare il filamento selezionato, fare clic sull'elenco nel campo **Filament**, quindi selezionare il filamento necessario.

5. Fare clic su **Next**.
6. Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile, quindi fare clic su **Next**.

Nota: L'utente può regolare manualmente i **Source and Gas Parameters** nella pagina Achieve Stable Spray/Modify.

7. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
8. Fare clic su **Next**.
9. (Opzionale) Salvare il report attenendosi alla seguente procedura:
 - a. Nella pagina Report, fare clic su **Save report as..**
 - b. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il report, digitare un **File name**, quindi fare clic su **Save**.
10. Fare clic su **Next**.
11. Fare clic su **Save Settings**.

Esecuzione della riduzione di fondo EI EAD (sistemi ZenoTOF)

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **EAD EI Background Reduction** dall'elenco **Tuning Procedures**. Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo e i prerequisiti della procedura di tuning.
3. Fare clic su **Next**.

Istruzioni operative – Acquisizione

4. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
5. Fare clic su **Next**.
6. (Opzionale) Salvare il report attenendosi alla seguente procedura:
 - a. Nella pagina Report, fare clic su **Save report as..**
 - b. Spostarsi sulla cartella in cui verrà salvato il report, digitare un **File name**, quindi fare clic su **Save**.

Esecuzione della diagnostica EAD (sistemi ZenoTOF)

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **EAD Diagnostics** dall'elenco **Tuning Procedures**. Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo e i prerequisiti della diagnostica EAD.
3. Fare clic su **Next**.
4. Seguire le istruzioni visualizzate sullo schermo per ogni operazione. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Inizializzazione ADC (sistemi ZenoTOF)

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Selezionare **Tuning Procedures > ADC Initialization**. Viene visualizzata la pagina Introduction. Descrive lo scopo dell'inizializzazione.
3. Fare clic su **Next**. Viene mostrata la pagina ADC Initialization. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Procedura avanzata di risoluzione dei problemi

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Assicurarsi che sia installata la provetta giusta.

Se la procedura di sintonizzazione non offre risultati soddisfacenti, utilizzare questa procedura avanzata di risoluzione dei problemi per ottimizzare i parametri relativi allo spettrometro di massa. Gli utenti possono inoltre visualizzare le statistiche del canale TDC e gli spettri durante l'acquisizione.

Suggerimento! È possibile utilizzare la finestra Live Method per visualizzare i parametri ottimizzati dopo aver eseguito la sintonizzazione.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
 2. Selezionare **Advanced Troubleshooting** dall'elenco **Tuning Procedures**.
 3. Selezionare un tipo di acquisizione.
-

4. Fare clic su **Edit Method**, quindi modificare i parametri nella finestra Live Method secondo necessità.
5. Fare clic su **Start/Restart Method**.
6. Visualizzare i dati, quindi regolare i parametri secondo necessità.
7. Fare clic su **Stop**, quindi salvare i parametri del rilevatore o i parametri TOF MS secondo necessità.

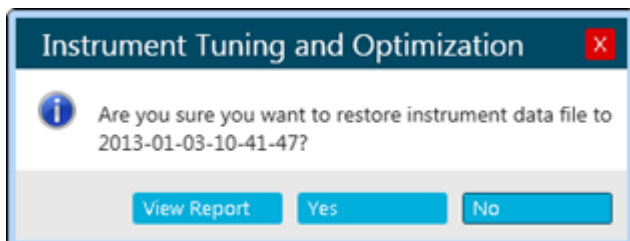
Restore Instrument Data

Il software genera una copia del file di dati dello strumento (dat), quindi aggiorna il file dat attuale ogni qualvolta l'utente salva le impostazioni di sintonizzazione al termine di ciascuna procedura di sintonizzazione. Le impostazioni precedentemente salvate possono essere ripristinate usando la funzione **Restore Instrument Data**.

Quando si esegue ciascuna procedura di sintonizzazione, il rapporto e i file di dati vengono generati per tenere traccia dei risultati ottimizzati. Per impostazione predefinita, il file di dati wiff2 e il report sono reperibili in D:\SCIEX OS Data\Optimization.

1. Aprire l'area di lavoro MS Tune.
2. Dal menu **Restore Instrument Data**, selezionare un file dat con timestamp precedente da ripristinare.

Figura 5-7: Finestra di dialogo Instrument Tuning and Optimization (Calibrazione e sintonizzazione dello strumento)



3. (Opzionale) Visualizzare il report per il file dat da ripristinare come segue:
 - a. Fare clic su **View Report**.
 - b. Se è stato generato un report per il file dati strumento selezionato, cercare e fare doppio clic sul report per aprirlo.
4. Fare clic su **Yes**.

Area di lavoro Explorer

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente
Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Apertura dei campioni

Prima di eseguire le attività di revisione dei dati nell'area di lavoro Explorer, aprire i campioni da verificare.

1. Aprire l'area di lavoro Explorer.
2. Per aprire un campione singolo, procedere come segue:
 - a. Fare clic su **File > Open Sample**.
Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.
 - b. Cercare e selezionare il campione da aprire.
 - c. Fare clic su **OK**.
3. Per aprire più campioni, procedere come segue:
 - a. Fare clic su **File > Open Multiple Samples**.
 - b. Nella finestra di dialogo Select Samples, selezionare i campioni presenti nell'elenco **Available**, quindi fare clic sulla freccia per spostarli nell'elenco **Selected**.

Suggerimento! Per selezionare un campione, espandere il file, fare clic sul campione, quindi sulla freccia.

- c. Fare clic su **OK**.

Verifica della presenza di un analita

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni.

1. Estrarre gli ioni. Fare riferimento alla sezione: [Estrazione di ioni](#).
2. (Opzionale) Mostrare la tabella dati e picchi. Fare riferimento alla sezione: [Visualizzazione della tabella dati e picchi](#).
3. Rivedere l'area dei picchi, l'intensità, le masse e gli stati di carica dei composti.
Per i sistemi SCIEX Triple Quad, lo stato di carica è disponibile solo per i tipi di dati a scansione completa.

Estrazione di ioni

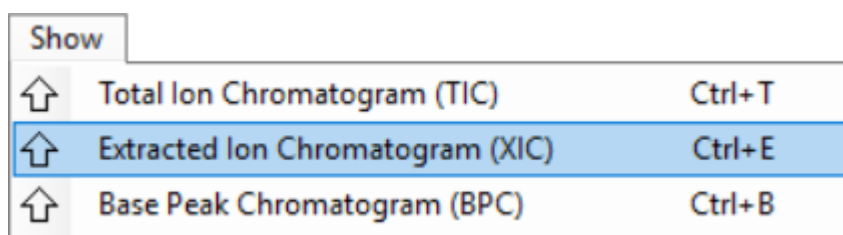
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Utilizzato per calcolare uno o più cromatogrammi ioni estratti sovrapposti (XIC), che è il plot della somma di intensità in un dato intervallo di masse come funzione del tempo di ritenzione.

1. Fare clic su **Show > Extract Ion Chromatogram (XIC)**.

Figura 6-1: Menu Show: Extracted Ion Chromatogram (XIC)



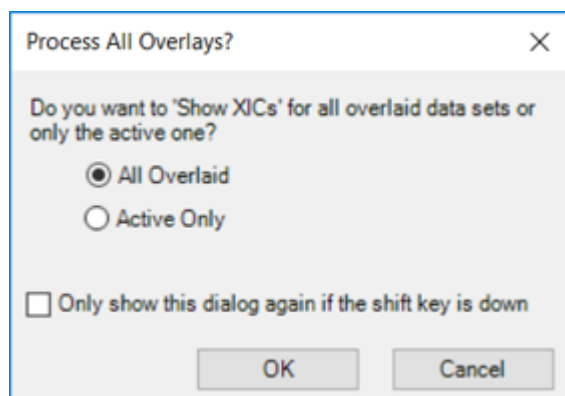
2. Se viene visualizzata la finestra di dialogo Specify XIC Ranges, eseguire la seguente procedura:
 - a. Immettere i valori **Center**, **Width** e **Compound** oppure importarli.

Nota: il titolo predefinito del XIC include i nomi dei composti mostrati nelle celle per una data riga.

Suggerimento! Quando si utilizza la modalità **Center/Width**, per il valore **Center** può essere specificata una formula chimica piuttosto che una massa. Quando si utilizza una composizione neutra, ad esempio H₂O, un protone viene automaticamente aggiunto per modalità positiva o sottratto per modalità negativa. Ad esempio, il rapporto *m/z* di H₃O⁺ è utilizzato per la modalità positiva. Specificare uno stato di carica esplicito terminando la composizione con '+*n*' o '-*n*' dove *n* è lo stato di carica. Se *n* viene omesso, si presume che sia uno. Ad esempio, quando è specificato H₂ONa⁺, il rapporto *m/z* di H₂ONa⁺ è utilizzato così com'è.

- b. (Opzionale) Utilizzare le funzioni nel menu contestuale per personalizzare le opzioni per l'estrazione di ioni. Per ulteriori informazioni, fare riferimento al documento: *Guida online*.
- c. Fare clic su **OK**.
Se il grafico attivo contiene serie sovrapposte provenienti da campioni diversi, si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? .

Figura 6-2: Finestra di dialogo Process All Overlays?



3. Se viene visualizzata la finestra di dialogo, Select MRMs, selezionare gli MRM da includere in XIC e fare clic su **OK**.
4. Se si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? attenersi alla seguente procedura:
 - a. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare **All Overlaid** per generare XIC sovrapposti per tutti i campioni disponibili.
 - Selezionare **Active Only** per generare XIC solo dal campione attualmente attivo.
 - b. Fare clic su **OK**.

Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.

Apertura di un cromatogramma ionico totale

Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni. |
|--|

Un cromatogramma ionico totale (TIC) è creato sommando i contributi di intensità di tutti gli ioni di una serie di scansioni di massa. Utilizzare il TIC per visualizzare un intero gruppo di dati in un singolo riquadro. Il TIC è costituito dalle intensità sommate di tutti gli ioni in una scansione tracciata rispetto al tempo in un riquadro cromatografico.

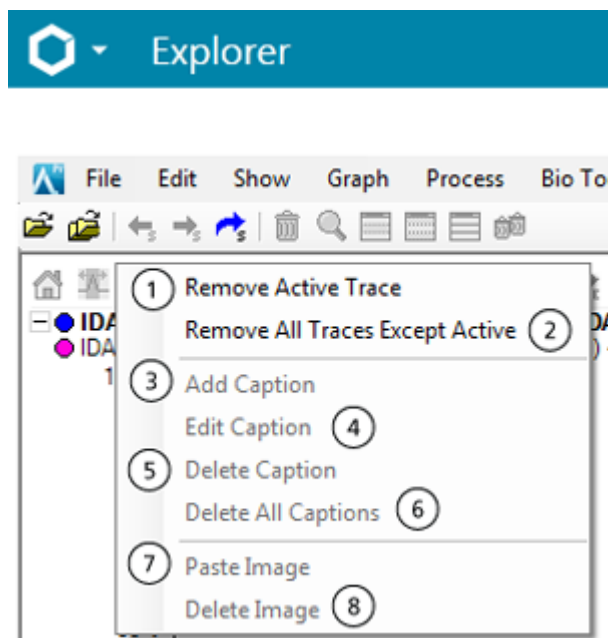
1. Fare clic su **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
Se il grafico attivo contiene serie sovrapposte provenienti da campioni diversi, si apre la finestra di dialogo Process All Overlays?.
2. Se si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? attenersi alla seguente procedura:
 - a. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare **All Overlaid** per generare TIC sovrapposti per tutti i campioni disponibili.

- Selezionare **Active Only** per generare TIC solo dal campione attualmente attivo.
- b. Fare clic su **OK**.

Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.

3. Fare clic con il pulsante destro sul TIC e utilizzare le funzioni nel menu pulsante destro.

Figura 6-3: Cromatogramma ionico totale: menu pulsante destro



Elemento	Descrizione
1	Disponibile quando è presente più di una traccia sovrapposta. Rimuove dal grafico la traccia attualmente attiva. Per rimuovere una traccia non attualmente attiva, attivarla e quindi selezionare la funzione.
2	Disponibile quando è presente più di una traccia sovrapposta. Rimuove tutte le tracce eccetto quella attualmente attiva. Se la traccia da tenere non è attualmente attiva, attivarla e quindi selezionare la funzione.

Elemento	Descrizione
3	<p>Aggiunge un testo a un grafico.</p> <p>Se necessario, fare clic su Font per regolare le proprietà del carattere, quindi fare clic su OK. La didascalia è aggiunta alla posizione (x, y) dove l'utente ha fatto clic con il tasto destro per aprire il menu.</p> <p>Dopo l'aggiunta della didascalia, l'utente può trascinarla in una nuova posizione. Se l'utente la trascina negli assi X o Y, annulla l'operazione di trascinamento.</p> <p>Le sequenze di caratteri “\d” e “\u” sono considerate in modo speciale. Nel primo caso, il carattere immediatamente successivo è rappresentato come pedice e nel secondo caso come apice. In entrambi i casi, i caratteri speciali non vengono visualizzati. Ciò è particolarmente utile per le formule chimiche. Ad esempio, 'H\d3O\u+' viene visualizzato come H₃O⁺.</p>
4	Modifica la didascalia selezionata. L'utente può anche aprire questa finestra di dialogo facendo doppio clic su una didascalia.
5	Elimina la didascalia selezionata. In alternativa, trascinare la didascalia fuori del grafico per eliminarla.
6	Disponibile se il grafico contiene almeno una didascalia. Rimuove tutte le didascalie in una volta sola.
7	Incolla un'immagine nel grafico.
8	Elimina dal grafico l'immagine selezionata.

Apertura di un cromatogramma picco base

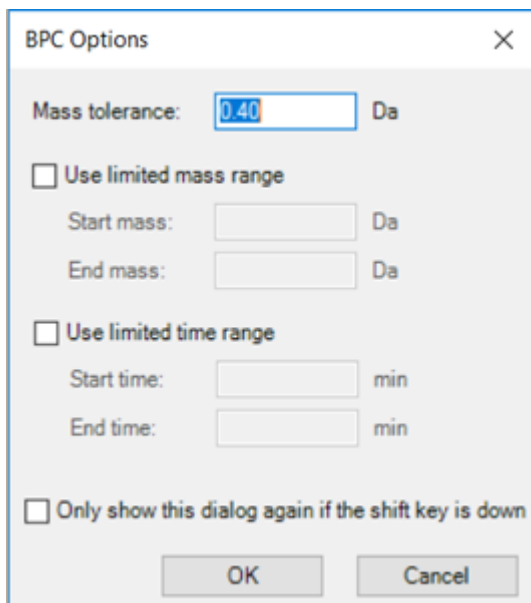
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Genera un tracciato dell'intensità del picco più grande in ciascuno spettro come funzione del tempo.

1. Fare clic su **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.

Figura 6-4: Finestra di dialogo BPC Options

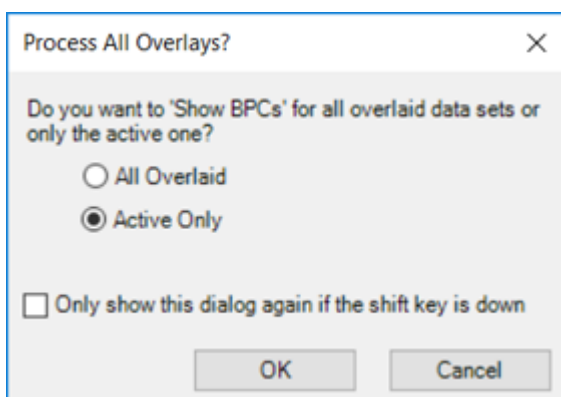


2. Completare i campi nella finestra di dialogo BPC Options. Per informazioni sui campi, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Nota: se quando viene generato il cromatogramma picco base è attivo un cromatogramma con una singola selezione che si estende per più di 1,0 minuti, l'intervallo di tempi predefinito è quello della selezione. Altrimenti, viene utilizzata l'ultimo intervallo di tempi. L'intervallo di tempi limitato evita all'utente di digitarlo manualmente.

Se il grafico attivo contiene serie sovrapposte provenienti da campioni diversi, si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? .

Figura 6-5: Finestra di dialogo Process All Overlays?



3. Se si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? attenersi alla seguente procedura:
 - a. Eseguire una delle seguenti operazioni:

Istruzioni operative - Elaborazione

- Selezionare **All Overlaid** per generare BPC sovrapposti per tutti i campioni disponibili.
- Selezionare **Active Only** per generare BPC solo dal campione attualmente attivo.

b. Fare clic su **OK**.

Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.

Visualizzazione della tabella dati e picchi

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni.

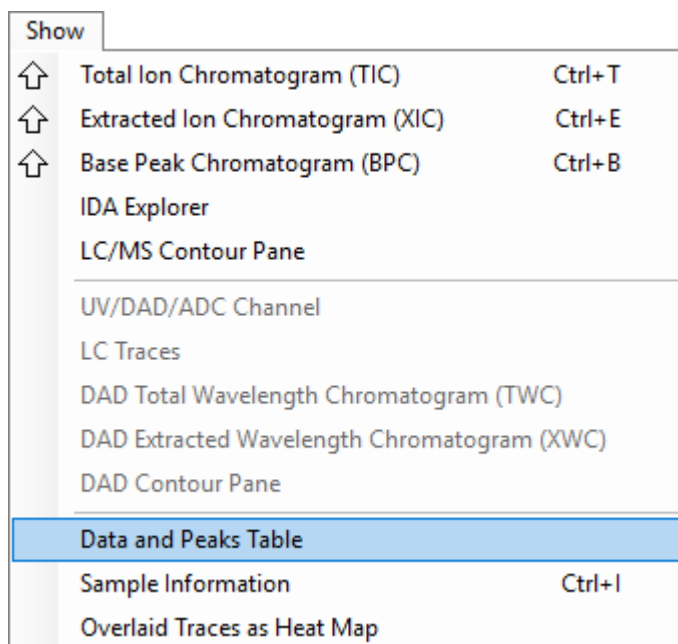
La tabella dati e picchi comprende due diverse tabelle. La tabella dati mostra i valori (X, Y) grezzi che comprende un set di dati, mentre la tabella picchi mostra informazioni sui picchi. La tabella viene generata quando è attivo un grafico.

Nota: sono presenti solo i picchi che sono sopra la soglia corrente nel grafico, impostati utilizzando la freccia blu sull'asse Y del grafico. Fare riferimento alla sezione: [Utilizzo dei dati nei grafici](#).

Questa funzione è utilizzata per visualizzare un riquadro contenente due tabelle per i dati attualmente attivi: una tabella per i valori grezzi (X, Y) e una per l'elenco dei picchi.

1. Fare clic su **Show > Data and Peaks Table**.

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



2. Utilizzare le funzioni nella tabella seguente.

Tabella 6-1: Funzioni della Data and Peaks Table

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Ordinare la tabella sulla base di quel campo.	Fare clic sull'intestazione della colonna.
Copiare le celle attualmente selezionate.	Fare clic con il pulsante destro del mouse nella tabella, quindi fare clic su Copy . Se è attiva la scheda Data, vengono copiati i valori X e Y. Se è attiva la scheda Peaks, vengono copiate le informazioni sul picco selezionato.
Copiare solo righe selezionate.	Prima selezionare le righe trascinandole nella colonna del selettore di riga o mediante i tasti Shift o Ctrl per selezionare più righe. Quindi, fare clic con il pulsante destro del mouse nella tabella e fare clic su Copy .
Selezionare più colonne.	Tenere premuto il tasto Ctrl e quindi fare clic sulle intestazioni delle colonne. Se l'utente fa clic solo su un'intestazione della colonna, la colonna verrà ordinata.
Copiare tutta la tabella.	Fare clic su Edit > Select All , quindi su Edit > Copy .
Esportare i dati come testo.	Fare clic col pulsante destro nel riquadro, quindi fare clic su Export Data as Text . Salva tutto l'elenco dei dati nel file specificato. I valori X e Y sono separati con una tabulazione e vi è un ritorno a capo dopo ogni coppia (X, Y).

Tabella 6-1: Funzioni della Data and Peaks Table (continua)

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Esportare i dati dell'elenco dei picchi come testo.	Fare clic col pulsante destro nel riquadro, quindi fare clic su Export Peak List as Text . Salva tutto l'elenco dei picchi nel file specificato. Non sono compresi i picchi che si trovano sotto l'attuale soglia fissata nell'asse Y del grafico associato. Le metriche dei picchi sono separate con una tabulazione e vi è un ritorno a capo dopo ogni picco.

3. Rivedere l'area dei picchi, l'intensità, le masse e gli stati di carica dei composti.

Visualizzazione delle informazioni sui campioni

Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni. |
|--|

Il riquadro Sample Information mostra una descrizione testuale dell'esperimento utilizzato per acquisire i dati attivi. Queste informazioni includono dati specifici dei campioni, inclusi il nome del campione e le informazioni sull'acquisizione dei dati, come il numero e tipo degli esperimenti.

Se sono visibili due o più riquadri Sample Information, associati a campioni diversi dallo stesso file di dati, facendo clic su una voce nella visualizzazione albero per uno qualsiasi dei riquadri, gli altri riquadri scorreranno fino alla sezione corrispondente. Questo presuppone che sezioni con gli stessi nomi esistano in tutti i riquadri. Questa funzione è utile se l'utente desidera confrontare due riquadri Sample Information simili, ma non identici.

Fare clic su **Show > Sample Information**.

Visualizzazione delle informazioni sulla selezione del grafico

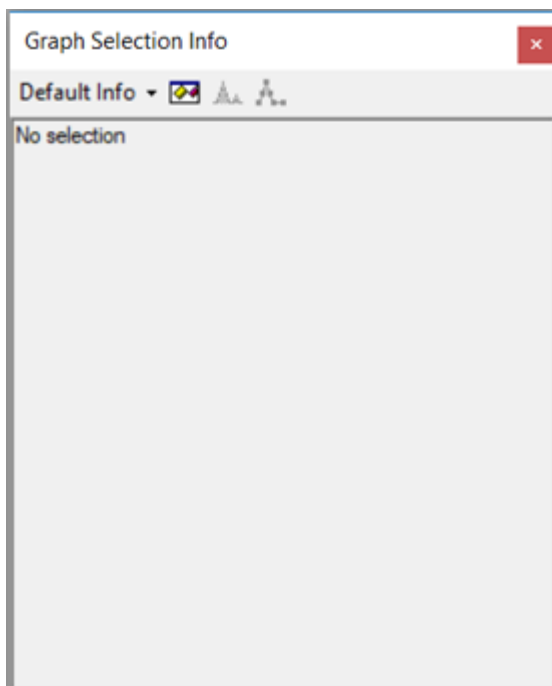
Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni. |
|--|

La finestra di dialogo Graph Selection Information mostra le informazioni sulla regione selezionata in un cromatogramma o uno spettro ed è generata quando uno di questi riquadri è attivo.

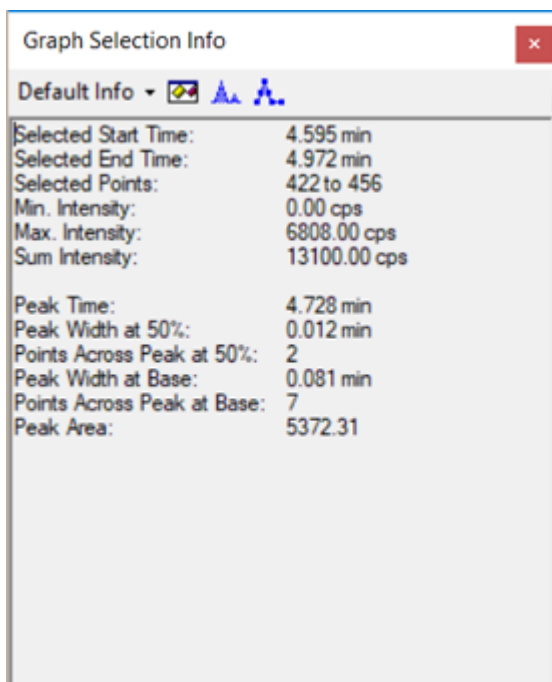
1. Fare clic su **Window > Graph Selection Window**.

Figura 6-7: Finestra di dialogo Graph Selection Info



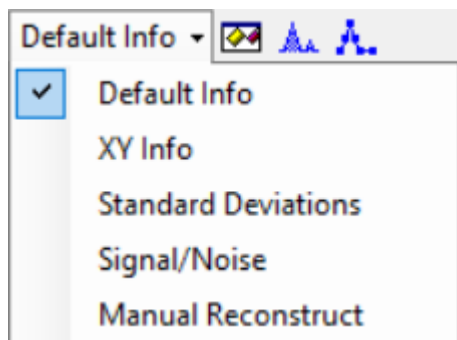
2. Eseguire una o più selezioni del grafico cromatogramma o spettro.

Figura 6-8: Finestra di dialogo Graph Selection Info



3. Selezionare un'opzione dall'elenco: **Default Info**, **XY Info**, **Standard Deviations**, **Signal/Noise** o **Manual Reconstruct**, se applicabile.

Figura 6-9: Opzioni informazioni selezione



Per una descrizione dei campi della finestra di dialogo, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

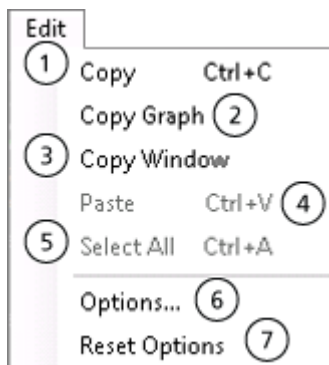
4. (Opzionale) Calcolare manualmente il rapporto segnale-rumore.
 - a. Selezionare un cromatogramma o, nel flusso di lavoro di ricostruzione massa, un grafico di ricostruzione.
 - b. Selezionare sia l'area del rumore che il picco di destinazione, utilizzando il tasto **Shift** per effettuare selezioni multiple.
 - c. Selezionare **Default Info > Signal/Noise**.
5. (Opzionale) Fare clic su **Options** (🔍), impostare le opzioni Graph Info e fare clic su **OK**. Per una descrizione delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
Ad esempio, per utilizzare 3 Sigma come moltiplicatore del rumore, impostare **Noise multiplier for S/N** su **3**.
6. (Opzionale) Fare clic su **Fill Peaks** (📊).
Nel grafico attivo, passa tra una modalità nella quale i picchi sono riempiti alternativamente con colore scuro e chiaro e una modalità cui non lo sono. Questa funzione è utile se l'utente desidera vedere l'estensione del picco che corrisponde alla **Peak Width at Base**.
7. (Opzionale) Fare clic su **Show Point Symbols** (📍).
Tutti gli spettri nel quadro attivo passano tra una modalità nella quale i punti dati sono indicati con simboli punto e una modalità in cui non lo sono. Questa funzione è utile se l'utente sta esaminando un picco e desidera vedere quanti punti dati comprende, anziché utilizzare solo le informazioni testuali mostrate nella finestra principale.

Modifica delle impostazioni nei grafici

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni.

Fare clic su **Edit** e utilizzare le funzioni nel menu **Edit**.

Figura 6-10: Menu Edit: Options



Elemento	Descrizione
1	Copia i dati attuali negli appunti. Quando uno spettro o un cromatogramma è attivo, viene copiata un'immagine di questo grafico attivo.
2	Quando uno spettro o un cromatogramma sono attivi, copia il grafico corrente negli appunti sotto forma di immagine.
3	Copia un'immagine di tutta la finestra attiva negli appunti. La barra del titolo della finestra e le barre degli strumenti dei suoi vari riquadri non sono incluse.
4	Incolla i dati dagli appunti nella vista attuale.
5	Quando una tabella è attiva, seleziona tutte le righe della tabella. Quando un riquadro di testo è attivo, seleziona tutto il testo.
6	Consente all'utente di impostare opzioni per l'aspetto del grafico, l'etichettatura e il rilevamento dei picchi, il trattamento automatico e il calcolo degli intervalli di XIC. Fare riferimento alla sezione: Impostazione delle opzioni .
7	Ripristina le opzioni predefinite di Explorer. Fare riferimento alla sezione: Ripristino delle opzioni .

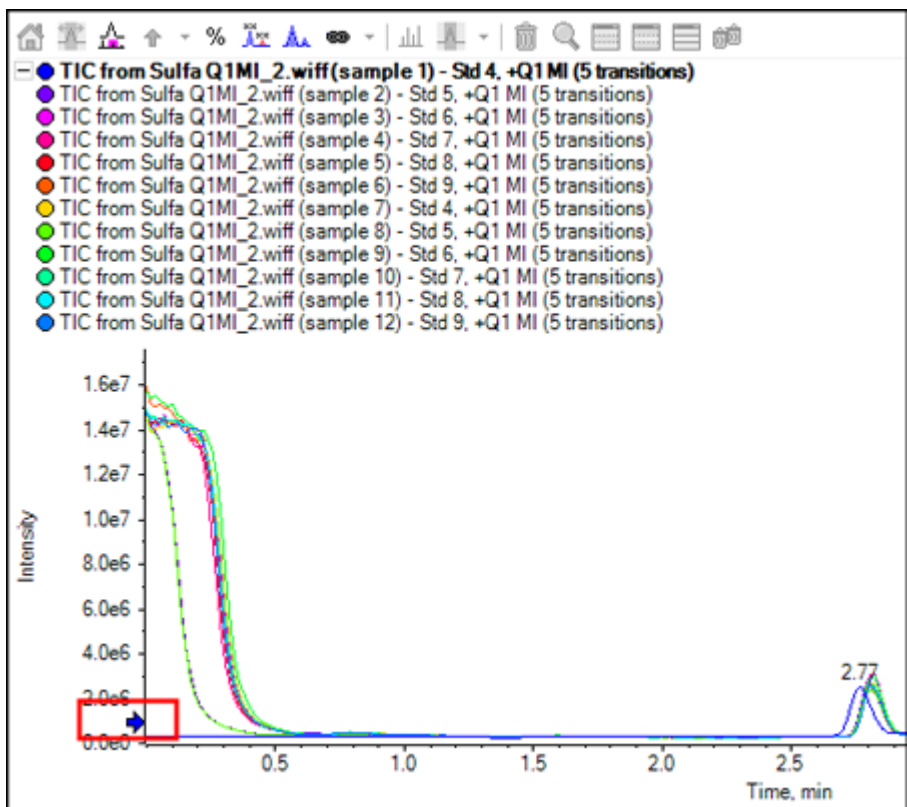
Utilizzo dei dati nei grafici

Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni](#).

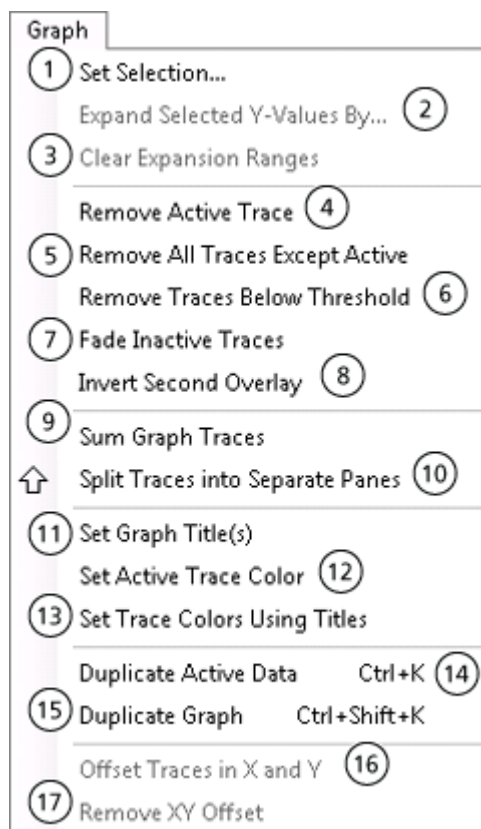
1. Per impostare la soglia per l'etichettatura dei picchi e le opzioni successive, come la tabella **Data and Peaks**, trascinare la freccia blu mostrata sull'asse Y dei grafici.

Figura 6-11: Freccia blu sull'asse delle Y



2. Utilizzare le funzioni nel menu **Graph**.

Figura 6-12: Menu Graph: Opzioni



Elemento	Descrizione
1	<p>Seleziona parti di grafici da elaborare in operazioni successive. Per esempio, selezionare un'area in un cromatogramma, quindi fare doppio clic per ottenere uno spettro medio. Utilizzare l'opzione Set Selection per immettere gli intervalli di X specifici in modo che le selezioni possano essere impostate in modo più preciso di quanto sia possibile utilizzando il cursore.</p> <ol style="list-style-type: none"> a. Fare clic su Graph > Set Selection. Viene aperta la finestra di dialogo Set Selection. b. Inserire i valori Center e Width. c. Fare clic su OK. <p>Suggerimento! Per impostare le selezioni in un grafico manualmente, trascinare il cursore nella regione del tracciato per effettuare una selezione. Se il tasto Shift viene tenuto premuto, tutte le selezioni correnti saranno conservate.</p>

Elemento	Descrizione
2	<p>Espande i valori Y in un intervallo per un fattore specificato ai fini del tracciato.</p> <ol style="list-style-type: none"> Aprire uno o più campioni. Selezionare una parte del grafico. Fare clic su Graph > Expand Selected Y-Values by. Viene aperta la finestra di dialogo Expand Selection. Inserire il fattore di espansione. Fare clic su OK.
3	<p>Rimuove tutti gli intervalli di espansione.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con gamme ampliate, fare clic su Graph > Clear Expansion Ranges.
4	<p>Rimuove dal grafico la traccia attualmente attiva. Questa funzione è disponibile quando è presente più di una traccia sovrapposta.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Remove Active Trace.
5	<p>Rimuove tutte le tracce eccetto quella attualmente attiva. Questa funzione è disponibile quando è presente più di una traccia sovrapposta.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Remove All Traces Except Active.
6	<p>Rimuove dal grafico le tracce sovrapposte per le quali tutti i punti dati si trovano sotto la soglia impostata.</p> <p>Se l'utente ha ingrandito il grafico in modo che solo una parte dell'intervallo di X sia attualmente visibile, si aprirà una finestra di dialogo. L'utente può selezionare se rimuovere le tracce che si trovano sotto la soglia utilizzando tutto l'intervallo oppure solo la parte attualmente visibile.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Remove Traces Below Threshold.
7	<p>Quando un grafico contiene più di una traccia sovrapposta, disegna tutte le tracce eccetto quella attualmente attiva con un colore più sfumato, meno intenso di quello normale. Utilizzare questa funzione per focalizzare la traccia attiva. Le tracce inattive non sono un elemento di distrazione. Per tornare allo stile originale, selezionare nuovamente la funzione.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Fade Inactive Trace.

Elemento	Descrizione
8	Quando il grafico attivo contiene più di una traccia sovrapposta, inverte la seconda traccia. Ciò può semplificare il confronto visivo di due tracce simili. Selezionare nuovamente Invert Second Overlay per tornare alla schermata originale.
9	Sostituisce i grafici con una traccia singola che rappresenta la somma di tutte le tracce. <ul style="list-style-type: none"> In un grafico contenente più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Sum Graph Traces.
10	Crea un grafico per ogni sovrapposizione separata. Ad esempio, se l'utente inizia con un grafico contenente tre tracce sovrapposte e quindi seleziona questa funzione, il risultato finale contiene quattro riquadri: il grafico originale con le sovrapposizioni e un grafico per ciascuno dei singoli gruppi di dati. <ol style="list-style-type: none"> In un grafico contenente più di una traccia sovrapposta, fare clic su Graph > Split Traces into Separate Panes. Viene aperta la finestra di dialogo Number of Columns. Selezionare il numero di colonne nell'output. Il numero di righe richiesto è determinato sulla base del numero di righe e del numero di tracce sovrapposte. Selezionare la casella di controllo per aprire i riquadri in una nuova finestra. Se la casella di controllo non è selezionata, i riquadri vengono aperti nella stessa finestra.
11	Si apre la finestra di dialogo Set Titles. Utilizzare questa opzione per modificare manualmente i titoli delle tracce.
12	Si apre la finestra di dialogo Color. Utilizzare questa opzione per impostare il colore della traccia del grafico attualmente attiva.
13	Si apre la finestra di dialogo Set Trace Colors Using Titles. Quando si sovrappongono più tracce del grafico, il software utilizza colori predefiniti per le sovrapposizioni. Utilizzare questa opzione per impostare colori specifici per le tracce il cui titolo contiene un testo specifico.
14	Crea una copia dei dati del grafico attualmente attivo e la aggiunge a tale grafico. Utilizzare questa funzione per vedere l'effetto di una particolare operazione di trattamento dati. Per esempio, se l'utente duplica i dati utilizzando questa funzione e quindi sfuma una delle due tracce, il grafico risultante conterrà visualizzazioni prima e dopo sovrapposte. <ul style="list-style-type: none"> In un grafico attivo, fare clic su Graph > Duplicate Active Data.

Elemento	Descrizione
15	<p>Crea una copia del grafico attualmente attivo. Utilizzare questa funzione per vedere l'effetto di una particolare operazione di trattamento dati. Per esempio, se l'utente duplica i dati utilizzando questa funzione e quindi sfuma una delle due tracce, saranno visibili visualizzazioni prima e dopo in due grafici separati. Collegare gli assi X in modo che l'ingrandimento di un grafico ingrandisca l'altro automaticamente.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico attivo, fare clic su Graph > Duplicate Graph.
16	<p>Si apre la finestra di dialogo Offset Traces. Utilizzare questa opzione per creare un istogramma in pila tridimensionale da una serie di tracce del grafico sovrapposte.</p>
17	<p>Rimuove gli offset generati dal TIC.</p>

Utilizzo degli strumenti per operazioni su due riquadri

Procedure preliminari

- Aprire l'area di lavoro Explorer.

Utilizzare le icone lungo il bordo destro dei riquadri per eseguire operazioni su due riquadri, quello di origine e quello di destinazione. Fare riferimento alla sezione: [Tabella 6-2](#). In tutti i casi, fare clic sull'icona nel riquadro di origine e poi trascinarlo in quello di destinazione.

Tabella 6-2: Strumenti Due Riquadri


Icona	Nome	Descrizione
	Move Pane	<p>Modifica le posizioni relative dei riquadri. Visualizzato nell'angolo superiore destro di ciascun riquadro. Fare clic sull'icona in un riquadro e poi trascinarlo nella parte superiore, inferiore, sinistra o destra di un secondo riquadro. A seconda del punto in cui viene rilasciato il cursore, il primo riquadro cambia le posizioni rispetto al secondo. Quando l'utente trascina il riquadro, un lato del secondo riquadro viene evidenziato in rosso per indicare dove sarà collocato il primo riquadro.</p> <p>Nota: l'utente può anche trascinare riquadri da una finestra a un'altra.</p>

Tabella 6-2: Strumenti Due Riquadri (continua)



Icona	Nome	Descrizione
	Add Data	<p>Somma due set di dati insieme, punto per punto. I dati del riquadro sul quale è stato fatto clic in origine vengono aggiunti al riquadro di destinazione, il riquadro sopra il quale viene rilasciata l'icona trascinata. Il titolo del riquadro modificato si aggiorna per indicare che è stato modificato.</p> <hr/> <p>Nota: È possibile solo aggiungere due set di dati dello stesso tipo. Per esempio, l'utente non può aggiungere uno spettro a un cromatogramma.</p> <hr/> <p>Suggerimento! Se il grafico di destinazione contiene più di una traccia sovrapposta, per impostazione predefinita i dati di origine vengono aggiunti solo ai dati di destinazione attivi. Tenere premuto il tasto Ctrl per aggiungere l'origine a tutti i set di dati nel riquadro destinazione.</p> <hr/>
	Subtract Data	<p>Sottrae il fondo da uno spettro di massa. Simile all'icona Add Data se non per il fatto che i dati di origine vengono sottratti dai dati di destinazione.</p> <hr/> <p>Suggerimento! Se il grafico di destinazione contiene più di una traccia sovrapposta, per impostazione predefinita i dati di origine vengono sottratti solo ai dati di destinazione attivi. Tenere premuto il tasto Ctrl per aggiungere l'origine a tutti i gruppi di dati nella destinazione.</p> <hr/> <p>Suggerimento! Normalmente i punti dati per i quali l'intensità nell'origine è maggiore che nella destinazione non vengono conservati. Ciò significa che i valori Y negativi vengono eliminati. Tenere premuto il tasto Shift per conservare i punti con intensità negativa.</p> <hr/>

Tabella 6-2: Strumenti Due Riquadri (continua)

Icona	Nome	Descrizione
	Overlay Data	<p>Sovrappone i dati attivi nel grafico di origine sul grafico di destinazione. Dopo il completamento dell'operazione, il grafico di destinazione conterrà una nuova serie con una copia dei dati di destinazione.</p> <p>Suggerimento! Se il grafico di origine contiene più di una traccia sovrapposta, per impostazione predefinita solo una copia dei suoi dati attivi verrà spostata nel grafico di destinazione. Tenere premuto il tasto Ctrl per sovrapporre una copia di tutti i gruppi di dati nel grafico di origine sul grafico di destinazione.</p>

Spostamento di riquadri o finestre

Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Fare clic su **Window** e utilizzare le funzioni nel menu **Window**.

Figura 6-13: Menu Window: Options



Elemento	Descrizione
1	<p>Apri una finestra che mostra le informazioni relative alla regione selezionata nel grafico attivo. Ad esempio, l'intervallo X della selezione, l'intervallo di intensità dei punti selezionati e così via. Se questa finestra è già visibile, selezionando la voce del menu si chiuderà. Fare riferimento alla sezione: Visualizzazione delle informazioni sulla selezione del grafico.</p>
2	<p>Modifica il layout delle informazioni nella finestra dal formato riga al formato colonna.</p>
3	<p>Rimuove il riquadro attualmente attivo dalla sua finestra e lo colloca in una nuova finestra.</p>

Elemento	Descrizione
4	Dispone le finestre aperte che non sono state ridotte a icona in modo che siano tutte una accanto all'altra in un'unica riga.
5	Dispone le finestre aperte che non sono state ridotte a icona in modo che siano tutte una sopra o sotto l'altra in un'unica colonna.

Esecuzione dello smoothing gaussiano

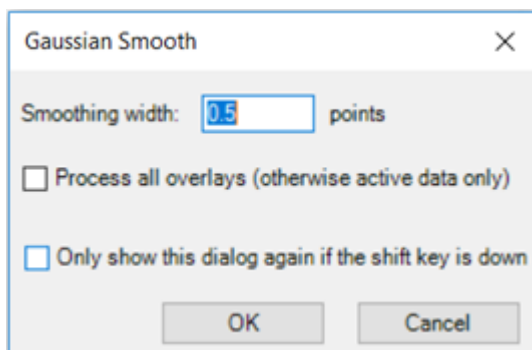
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Applica un algoritmo di smoothing gaussiano. Si tratta di un filtro di una larghezza specificata dove i fattori di pesatura seguono una funzione gaussiana o normale.

1. Fare clic su **Process > Gaussian Smooth**.

Figura 6-14: Finestra di dialogo Gaussian Smooth



2. Immettere un valore nel campo **Smoothing width**. Questa è in realtà la larghezza della funzione gaussiana a metà della sua massima altezza. La larghezza totale è maggiore perché il calcolo è eseguito nei bracci della funzione gaussiana. I valori frazionari sono consentiti, nel qual caso la larghezza a metà della funzione gaussiana è meno di un punto.
3. Se il grafico attivo contiene più tracce, selezionare **Process all overlays (otherwise active data only)** per applicare l'operazione a tutte le tracce. Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.
4. Fare clic su **OK**.

Dati di soglia

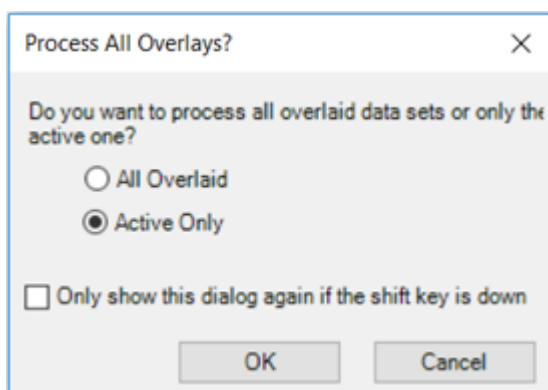
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Rimuove tutti i punti dati aventi un'intensità inferiore alla soglia attualmente impostata. Imposta la soglia trascinando la freccia blu mostrata nell'asse Y dei grafici.

1. Fare clic su **Process > Threshold Data**.
Se il grafico attivo contiene serie sovrapposte provenienti da campioni diversi, si apre la finestra di dialogo Process All Overlays?.

Figura 6-15: Finestra di dialogo Process All Overlays?



2. Se si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? attenersi alla seguente procedura:
 - a. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare **All Overlaid** per generare TIC sovrapposti per tutti i campioni disponibili.
 - Selezionare **Active Only** per generare TIC solo dal campione attualmente attivo.
 - b. Fare clic su **OK**.

Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.

Dati di sottogruppi con selezione grafico

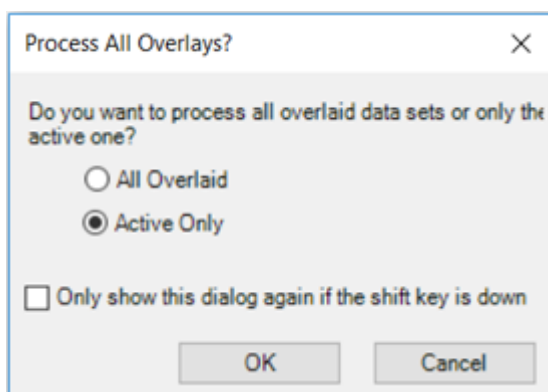
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Questa funzione è disponibile solo quando è attivo un grafico con esattamente una regione selezionata. Rimuove i punti dati che si trovano al di fuori della regione selezionata. Utilizzare questa funzione per focalizzare il trattamento di dati su un sottogruppo di tutti i dati.

1. Eseguire una selezione nel grafico.
2. Fare clic su **Process > Subset Data (using graph selection)**.
Se il grafico attivo contiene serie sovrapposte provenienti da campioni diversi, si apre la finestra di dialogo Process All Overlays?.

Figura 6-16: Finestra di dialogo Process All Overlays?



3. Se si apre la finestra di dialogo Process All Overlays? attenersi alla seguente procedura:
 - a. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Selezionare **All Overlaid** per generare XIC o TIC sovrapposti per tutti i campioni disponibili.
 - Selezionare **Active Only** per generare XIC o TIC solo dal campione attualmente attivo.
 - b. Fare clic su **OK**.

Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.

Sottrazione linea di base dal cromatogramma

Procedure preliminari

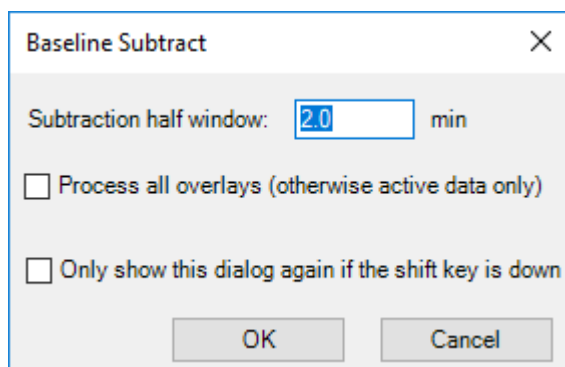
- [Apertura dei campioni.](#)

Rimuove da un cromatogramma un fondo che varia relativamente lentamente.

Per ciascun punto dati nel cromatogramma, viene centrata una finestra sul valore X corrispondente e vengono trovati i punti con intensità minima all'interno della finestra a sinistra e a destra. Una linea retta è tracciata tra questi due punti e il valore Y è calcolato al centro della finestra. Questa è la linea di base che viene rimossa dai dati a tale punto.

1. Fare clic su **Process > Baseline Subtract Chromatogram**.

Figura 6-17: Finestra di dialogo Baseline Subtract



2. Digitare un valore, in minuti, nel campo **Subtraction half window**.
3. Se il grafico attivo contiene più tracce, selezionare **Process all overlays (otherwise active data only)** per applicare l'operazione a tutte le tracce. Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.
4. Fare clic su **OK**.

Offset di cromatogramma

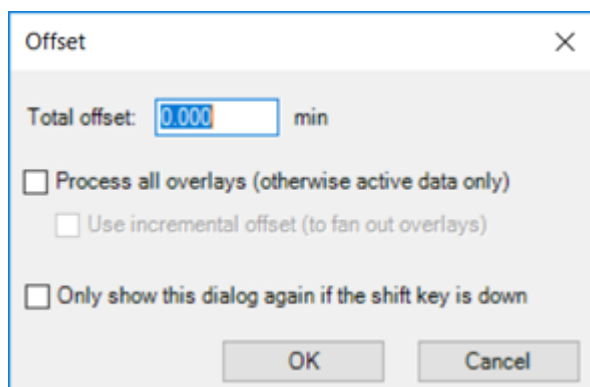
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni](#).

Utilizzato per compensare i valori temporali di un cromatogramma.

1. Fare clic su **Process > Offset Chromatogram**.

Figura 6-18: Finestra di dialogo Offset



2. Digitare un valore, in minuti, nel campo **Total offset**.

3. Se il grafico attivo contiene più tracce, selezionare **Process all overlays (otherwise active data only)** per applicare l'operazione a tutte le tracce.
Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.
4. Selezionare **Use incremental offset (to fan out overlays)** per distribuire le sovrapposizioni nella direzione temporale.
5. Fare clic su **OK**.

Centroide di uno spettro

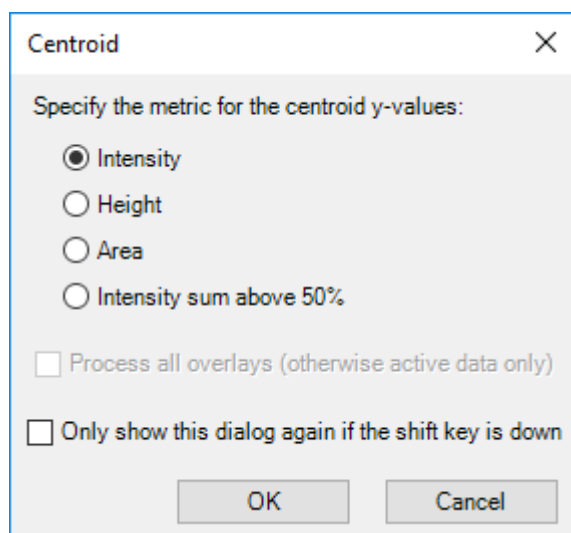
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni](#).

Crea un centroide di uno spettro di massa, cioè sostituisce il profilo di uno spettro con punti massa e intensità solo per i picchi rilevati.

1. Fare clic su **Process > Centroid Spectrum**.

Figura 6-19: Finestra di dialogo Centroid



2. Selezionare la metrica da utilizzare per il processo centroide:
 - **Intensity**: Per ciascun picco, il valore y centroide rappresenta l'intensità del punto dati più grande comprendente il picco.
 - **Height**: Questa metrica è simile alla metrica Intensity, tranne che l'intensità è sottratta dall'intensità della linea di base quando è presente un offset della linea di base.

Istruzioni operative - Elaborazione

- **Area:** Per ciascun picco, il valore Y centroide rappresenta l'area totale del picco. Questo è un vero integrale, perché il valore riportato dipende sia dal profilo dell'intensità sia dalla larghezza del picco.
 - **Intensity sum above 50%:** per ciascun picco, il valore y rappresenta la somma della parte delle intensità comprendenti il picco che sono sopra il 50% dell'intensità dell'apice del picco. Questo valore è utile perché non dipende solo dall'intensità di un singolo punto dati, come le metriche Intensity e Height, e non è influenzato dai bordi del picco che può presentare un rumore di fondo o produrre interferenze.
3. Se il grafico attivo contiene più tracce, selezionare **Process all overlays (otherwise active data only)** per applicare l'operazione a tutte le tracce.
Se viene selezionata la casella di controllo **Only show this dialog again if the shift key is down**, l'azione selezionata viene sempre utilizzata a meno che l'utente non tenga premuto il tasto **Shift** per modificare l'opzione.
 4. Fare clic su **OK**.

Esportazione di dati come testo

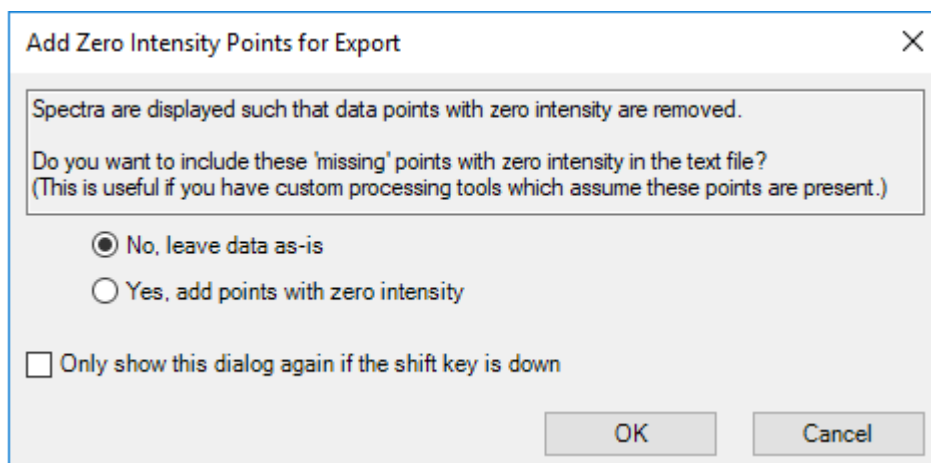
Procedure preliminari

- [Apertura dei campioni.](#)

Lo spettro o il cromatogramma attualmente attivo viene salvato in un file di testo delimitato da tabulazioni.

1. Fare clic su **File > Export > Data as Text**.
Se i dati spettrali sono esportati, si apre la finestra di dialogo Add Zero Intensity Points for Export.

Figura 6-20: Finestra di dialogo Add Zero Intensity Points for Export



2. Se si apre la finestra di dialogo Add Zero Intensity Points for Export eseguire una delle operazioni seguenti:

- Fare clic su **No, leave data as-is** per escludere i punti con intensità zero dal file esportato.
- Fare clic su **Yes, add points with zero intensity** per includere i punti con intensità zero nel file esportato.

Quindi fare clic su **OK**.

3. Digitare un nome file per il file esportato.
4. Fare clic su **Save**.

Esportazione dell'elenco dei picchi come testo

Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni. |
|--|

L'utente può salvare l'elenco dei picchi relativi allo spettro o al cromatogramma attualmente attivo in un file di testo delimitato da tabulazioni. Questo file contiene informazioni come valore x centroide (massa o tempo), area picco, altezza e così via.

1. Fare clic su **File > Export > Peak List as Text**.
2. Digitare un nome file per il file esportato.
3. Fare clic su **Save**.

Stampa dei dati

Procedure preliminari

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura dei campioni. |
|--|

1. Fare clic su **File > Print** e selezionare quindi l'opzione richiesta.
Si apre la finestra di dialogo Print.
2. Selezionare una stampante, quindi fare clic su **Print**.

Ripristino delle opzioni

Procedure preliminari

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none">• Aprire l'area di lavoro Explorer. |
|---|

L'utente può ripristinare tutte le opzioni nell'area di lavoro Explorer ai valori predefiniti. Sono incluse le opzioni descritte nella sezione precedente e le opzioni di elaborazione. Il ripristino delle opzioni riguarda solo l'utente di Windows attualmente connesso, non altri utenti dello stesso computer.

1. Fare clic su **Edit > Reset Options**.

Viene visualizzata una finestra di dialogo di conferma.

2. Fare clic su **OK**.

Impostazione delle opzioni

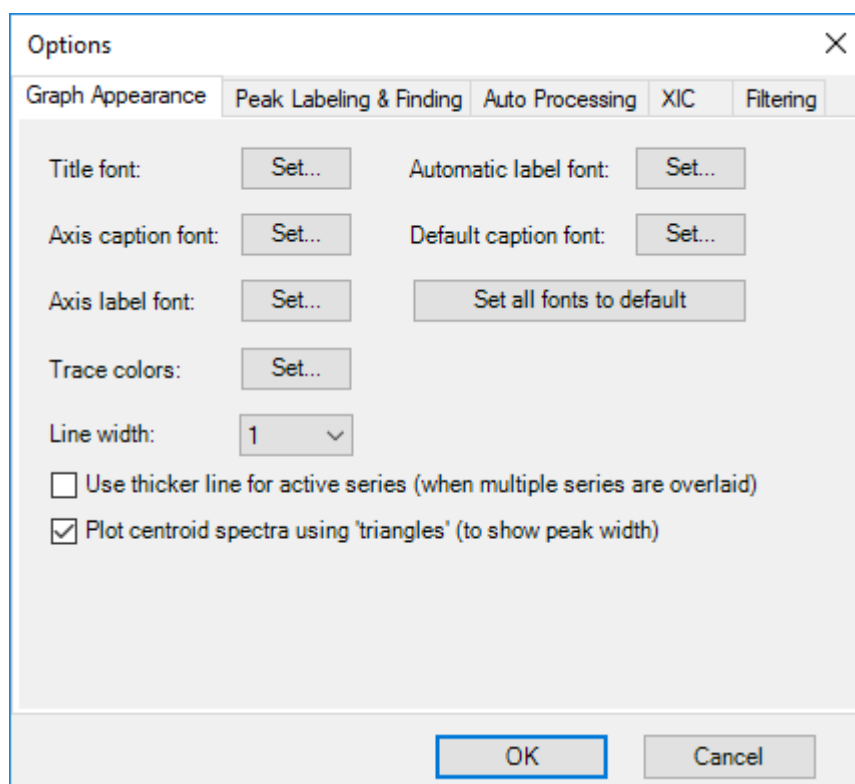
Procedure preliminari

- Aprire l'area di lavoro Explorer.

Usare le funzioni di ciascuna scheda come richiesto.

1. Fare clic su **Edit > Options**.

Figura 6-21: Finestra di dialogo Options: Scheda Graph Appearance



2. Impostare le opzioni in ogni pagina, come applicabile. Per le descrizioni delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
3. Fare clic su **OK**.

Area di lavoro Analytics

L'accesso alle funzioni in questa area di lavoro è controllato dal ruolo assegnato all'utente. Fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Nota: I modi controllati per ottenere dati dall'area di lavoro Analytics sono: esportazione delle tabelle di risultati, trasferimento di dati a un sistema LIMS e creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle Results Table non sono controllate. Non utilizzare modalità di output incontrollate a scopo regolamentato.

Il raggruppamento dei numeri non è supportato nell'area di lavoro Analytics. Non raggruppare i numeri in caselle di testo, ad esempio nei parametri di integrazione, o nelle griglie come una Results Table.

I metodi di trattamento includono i criteri utilizzati per quantificare i picchi selezionati per l'integrazione.

I revisori devono rivedere i dati secondo i criteri di integrazione picchi e accettazione dati nelle procedure operative standard di laboratorio (SOP).

SCIEX OS può elaborare i dati mentre vengono acquisiti da SCIEX OS o Analyst. I campioni acquisiti possono essere aggiunti alla Results Table. Per aggiungere i campioni acquisiti, attendere il termine dell'acquisizione e aggiungerli alla Results Table.

Definire i parametri di elaborazione predefinita per il progetto

Questa opzione imposta i parametri predefiniti di rilevamento picchi utilizzati durante la creazione di un metodo di trattamento. Se vi sono diversi componenti, impostare i valori predefiniti in base alla cromatografia in modo da non doverli regolare singolarmente per ogni componente. Tuttavia, nessun set di parametri è da considerarsi ottimale per tutti i componenti, pertanto per alcuni di essi può essere necessario regolare alcuni parametri singolarmente.

1. Nell'area di lavoro Analytics, fare clic su **Projects > Project default settings**.

Nota: Verificare che sia stato selezionato il nome del progetto corretto nel pannello dello stato.

Viene visualizzata la finestra di dialogo Project Default Settings.

2. Nella pagina Quantitative Processing, eseguire la seguente procedura:
 - a. Selezionare l'algoritmo segnale-rumore dall'elenco **Signal to Noise Algorithm**.
 - b. Selezionare un algoritmo di integrazione dall'elenco **Integration Algorithm** e quindi impostare i parametri predefiniti l'elaborazione quantitativa.

Per le descrizioni dei parametri, fare riferimento al documento: *Guida online*.

3. Nella pagina Qualitative Processing, selezionare un algoritmo di ricerca della libreria dall'elenco **Library Search Algorithm** e quindi impostare i parametri predefiniti per l'elaborazione qualitativa.

Per informazioni sugli algoritmi, fare riferimento al documento: *Guida online*.

4. Nella pagina Mass Reconstruction Processing, selezionare un algoritmo di integrazione dall'elenco **Integration Algorithm** e quindi impostare i parametri predefiniti per la ricostruzione massa.

Istruzioni operative - Elaborazione

Per le descrizioni dei parametri, fare riferimento al documento: *Guida online*.

Nota: Sono disponibili solo gli algoritmi MQ4 e Summation.

5. Fare clic su **Save**.
6. Fare clic su **Close**.

Utilizzo dei layout dell'area di lavoro

Utilizzare la funzionalità layout dell'area di lavoro per salvare layout dell'area di lavoro personalizzati nell'area di lavoro Analytics. Il layout personalizzato viene salvato con il file dei risultati e automaticamente applicato all'apertura del file. In questo modo, gli utenti impiegano meno tempo ad analizzare i risultati. Un layout dell'area di lavoro salvato può essere applicato ad altri file dei risultati. Può anche essere impostato come layout dell'area di lavoro predefinito per un progetto, da applicare ogni volta che viene aperto un file dei risultati nel progetto. I layout area di lavoro possono essere salvati in qualsiasi percorso, incluse le reti locali.

Gli utenti possono passare tra diversi layout salvati per eseguire tipi diversi di analisi dei dati nei file dei risultati.

Nota: Tutti i layout dell'area di lavoro vengono salvati con l'estensione del nome file qlayout.

Nota: Nessuna impostazione che può modificare o alterare dati direttamente viene conservata in un layout dell'area di lavoro.

Nella tabella seguente sono elencati gli elementi dell'interfaccia utente che vengono salvati con i layout dell'area di lavoro.

Tabella 6-3: Elementi dell'interfaccia utente salvati con i layout dell'area di lavoro

Riquadro	Elementi dell'interfaccia utente salvati
Results Table	<ul style="list-style-type: none">• Casella di controllo Qualify for Rules Filters.• Filtri riga idonei.• Scelta ordinamento tabella.• Righe e colonne evidenziate.• Table display settings.• Filtri colonna. <hr/> <p>Nota: Quando il layout dell'area di lavoro viene applicato a una Results Table diversa, se possibile vengono applicate le impostazioni del filtro colonna. Se una colonna filtrata non esiste in una Results Table o se un'opzione filtro non è applicabile, l'impostazione non viene applicata.</p> <hr/>

Tabella 6-3: Elementi dell'interfaccia utente salvati con i layout dell'area di lavoro (continua)

Riquadro	Elementi dell'interfaccia utente salvati
Menu Views	<ul style="list-style-type: none"> • Impostazione Show hidden pane. • Opzione Tabbed view selezionata o non selezionata.
Samples o Components and Groups	<ul style="list-style-type: none"> • Elenco Samples o Components and Groups aperto o chiuso. • Componenti o campioni specifici selezionati o meno per essere visualizzati in una Results Table. • Nell'elenco Samples, l'impostazione per Options > Synchronize Sample Selection. • Nell'elenco Components and Groups, la selezione delle opzioni All Internal Standards, All Analytes, All Components e Groups (where applicable). • Nell'elenco Components and Groups, l'impostazione per Options > Show IS
Peak Review	<ul style="list-style-type: none"> • Riquadro Peak Review aperto o chiuso e agganciato o meno. • View corrente. • Eventuali Options selezionate, inclusa l'opzione Peak review display settings e l'opzione XIC Graph Title.
Calibration Curve	<ul style="list-style-type: none"> • Riquadro Calibration Curve aperto o chiuso. • Impostazioni Show excluded standards, Show quality controls, Show legend, Use percent Y-axis e Log-log plot nel menu Options.
Metric Plot	<ul style="list-style-type: none"> • Riquadro Metric Plot aperto o chiuso. • Impostazioni del menu Link. • Impostazioni della finestra di dialogo Regression. • Impostazioni Display "N/A" as 0.0, Show sample names, Show legend, Use percent Y-axis, Start Y-axis at 0 e Connect with lines nel menu Options.
Riquadro Statistics	<ul style="list-style-type: none"> • Riquadro Statistics aperto o chiuso. • Selezioni Sample grouping attive. • Selezioni Metric attive.

Salvataggio del layout dell'area di lavoro corrente

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.

2. Aprire una Results Table.
3. Personalizzare il layout dell'area di lavoro in base alle esigenze.
4. Fare clic su **Views > Save current layout**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Save Workspace Layout As.
5. Digitare un nome per il layout dell'area di lavoro, quindi fare clic su **Save**.

Applicazione di un altro layout dell'area di lavoro al progetto corrente

Applicando layout dell'area di lavoro diversi al file dei risultati corrente, l'utente può eseguire rapidamente tipi diversi di analisi dei risultati sugli stessi dati.

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
2. Aprire un file dei risultati.
3. Fare clic su **Views > Apply different layout to current results**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Apply a Workspace Layout.
4. Fare clic su **Browse**, selezionare un layout, quindi fare clic su **Open**.
Nella finestra di dialogo Apply a Workspace Layout viene mostrata un'anteprima del layout dell'area di lavoro selezionata.
5. Fare clic su **OK**.

Suggerimento! Applicare i layout dell'area di lavoro usati di recente facendo clic su **Views > Recent layouts** e selezionando un layout.

Impostazione del layout dell'area di lavoro corrente come predefinito per il progetto

Impostando un layout dell'area di lavoro predefinito del progetto si mantiene un layout tra più sessioni o utenti. In questo modo, si aprono i nuovi file dei risultati creati nel progetto con il layout area di lavoro predefinito del progetto.

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
2. Aprire un file dei risultati.
3. Personalizzare il layout dell'area di lavoro in base al progetto.
4. Fare clic su **Views > Set current layout as project default**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Default Workspace Layout for the Project.
5. Digitare un nome per il layout nel campo **Default layout name** e fare clic su **OK**.
6. Fare clic su **Results > Save**.

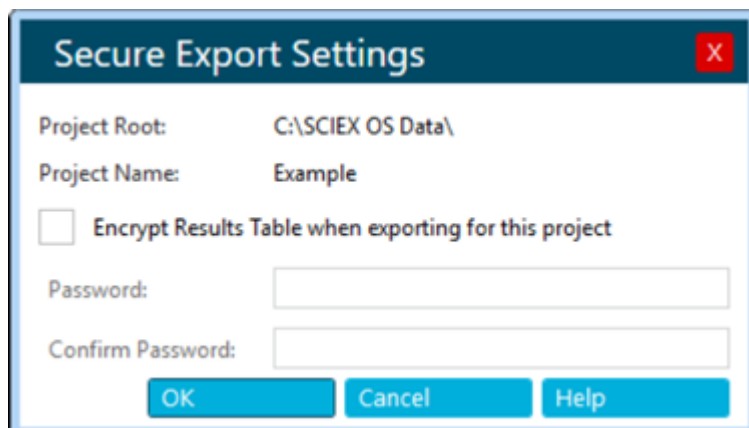
Definizione delle impostazioni di esportazione sicura del progetto

Solo un utente al quale è stato assegnato il ruolo di amministratore può eseguire questa attività.

Se questa opzione è selezionata, i dati nel file di testo vengono crittografati durante l'esportazione. Impostare una password per abilitare la crittografia.

1. Nell'area di lavoro Analytics, fare clic su **Projects > Project secure export settings**.

Figura 6-22: Finestra di dialogo Secure Export Settings



2. Selezionare la casella di controllo **Encrypt Results Table when exporting for this project**.
3. Immettere una password nel campo **Password**.
4. Immettere nuovamente la password nel campo **Confirm Password**.
5. Fare clic su **OK**.

Abilitazione dell'avviso di picco modificato del progetto

Per impostazione predefinita, questa opzione non è selezionata. Se selezionata, quando un utente modifica un cromatogramma in una Results Table e quindi salva le modifiche, un messaggio di avvertenza indica che è stata apportata una modifica. L'utente può scegliere se continuare con il salvataggio o tornare alla Results Table.

Nell'area di lavoro Analytics, fare clic su **Projects > Enable project modified peak warning**.

Creazione di un metodo di trattamento

I metodi di trattamento contengono impostazioni quantitative e qualitative per il trattamento dei dati. Il flusso di lavoro non mirato è utilizzato per i componenti sconosciuti.

Suggerimento! Per modificare un metodo di trattamento esistente, fare clic su **Process Method > Open**.

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
2. Fare clic su **Process Method > New**.

Suggerimento! Per modificare un metodo di trattamento per la Results Table attuale, fare clic su **Process Method > Edit embedded method** e continuare con il passaggio 3.

3. Nella pagina Workflow, selezionare almeno un flusso di lavoro e i campioni di riferimento. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento al documento: *Guida online*.
-

Suggerimento! Per utilizzare un flusso di lavoro di ricostruzione massa, selezionare solo **Quantitation**.

4. Selezionare la pagina Components e quindi eseguire la seguente procedura:
 - a. Se applicabile, selezionare il flusso di lavoro di ricostruzione massa facendo clic su **Options > Mass Reconstruction** e quindi su **Yes** nella finestra di dialogo di conferma.
 - b. Completare la tabella Components. Per le descrizioni dei campi in questa tabella, fare riferimento al documento: *Guida online*.
-

Nota: Il flusso di lavoro di ricostruzione massa è disponibile solo quando l'algoritmo di integrazione è impostato su **MQ4** o **Summation**.

Suggerimento! Se un gruppo è definito nella tabella Components, è possibile scegliere di sommare gli ioni nel gruppo, anche se lo ione precursore e l'indice dell'esperimento sono diversi per le transizioni. Gli ioni sommati non vengono mostrati nella tabella, ma nella pagina Integration e nella Results Table come **group name > Sum**. Questa opzione è utile per la quantificazione di proteine e peptidi.

Suggerimento! Quando il tempo di ritenzione dei componenti non è noto, impostare il **Retention Time Mode** per una massa o una formula chimica per **Find *n* peaks**, dove *n* è 1, 2, 5, 10 o tutto. Il software identifica il numero specificato di caratteristiche con l'area di picco maggiore, assegnando il tempo di ritenzione appropriato, ed esegue poi un flusso di trattamento picco mirato. Quando il trattamento è completato, il metodo nascosto per la Results Table può essere salvato come metodo mirato.

Suggerimento! Per importare i componenti o i componenti e i parametri di integrazione di un file di testo, utilizzare il comando appropriato dal menu **Import**. Se le informazioni sui componenti non contengono unità di concentrazione, il software utilizza le **Concentration units** definite nella finestra di dialogo Project Default Settings.

Nota: Non è possibile importare i parametri di integrazione dai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.

Nota: È possibile importare i parametri di integrazione dai metodi di quantificazione del software Analyst. Il parametri del software Analyst sono mappati ai parametri SCIEX OS corrispondenti e per eventuali parametri che non possono essere mappati vengono utilizzate le impostazioni predefinite del progetto.

Nota: I parametri di integrazione possono essere importati dai metodi di quantificazione del software MultiQuant che non utilizzano l'algoritmo SignalFinder. Per i metodi MQ4, **S/N Integration Threshold** viene modificato da 0, il valore predefinito nel software MultiQuant, al valore predefinito del progetto. I parametri per il software MultiQuant sono mappati ai parametri corrispondenti per SCIEX OS.

5. Selezionare la pagina Integration e quindi eseguire la seguente procedura:
- Selezionare i parametri di integrazione per ogni componente. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento al documento: *Guida online*.

Suggerimento! Per definire le regole per la rimozione automatica dei valori anomali, fare clic su **Options > Remove Outliers Automatically**. Fare riferimento al documento: *Guida online*.

- (Opzionale) Per visualizzare l'area del rumore, fare clic su **Options > Show Noise Regions**. Fare riferimento alla sezione: [Lavorare con l'area del rumore](#).

Nota: Show Noise Regions è visibile solo quando l'algoritmo segnale-rumore è impostato su **Standard Deviation** o **Peak to Peak**.

6. (Se applicabile) Selezionare la pagina Library Search e definire i parametri di ricerca della libreria. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento alla *Guida online*.
7. Selezionare la pagina Calculated Columns e definire poi qualsiasi formula personalizzata da utilizzare nelle colonne calcolate personalizzate. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento alla *Guida online*.

Nota: Per ulteriori informazioni sulle colonne calcolate, fare riferimento alla sezione: [Colonne calcolate](#).

8. Selezionare la pagina Flagging Rules e selezionare poi le regole da utilizzare per la segnalazione dei risultati nella Results Table. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento al documento: *Guida online*.
- Opzionalmente, creare regole di segnalazione personalizzate o personalizzare i seguenti valori per le regole predefinite:

- Criteri di accettazione per quanto segue:
 - Precisione degli standard e dei controlli qualità
 - Intervallo di concentrazione calcolata per campioni sconosciuti
 - Integrazione picco
- Impostazioni di semaforo per accuratezza delle masse, confidenza del tempo di ritenzione, corrispondenza degli isotopi, punteggio della libreria e punteggio della Formula Finder
- Impostazioni semaforo per l'accettazione rapporto ioni



Il rapporto ionico è il rapporto della risposta di picco, ossia area o altezza del qualificatore e del quantificatore.

Suggerimento! Per importare le regole di segnalazione da un file di testo, fare clic su **Import**.

9. Selezionare la pagina Formula Finder e selezionare le relative impostazioni. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento al documento: *Guida online*.
 10. Selezionare la pagina Non-targeted Peaks (disponibile solo quando si seleziona il flusso di lavoro non mirato), quindi definire i parametri della ricerca non mirata. Per le descrizioni dei campi in questa pagina, fare riferimento al documento: *Guida online*.
 11. Fare clic su **Save**.
-

Suggerimento! Quando si crea un metodo non mirato, i parametri predefiniti del progetto corrente vengono utilizzati per l'integrazione dei picchi e salvati nel file del metodo di trattamento. Se il metodo di trattamento contiene gli analiti mirati, i parametri di integrazione personalizzati per i componenti mirati non avranno effetti sull'integrazione dei picchi non mirati. Se l'utente modifica successivamente il parametro preimpostato del progetto, il parametro modificato non avrà effetti sul metodo non mirato esistente, che conterrà comunque i parametri al momento della creazione del metodo. Solo il metodo non mirato creato di recente utilizzerà i parametri modificati.

Elaborazione dati

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
 2. Fare clic su **Results > New**.
 3. Nella finestra di dialogo Process New Results, utilizzare le frecce ( e ) per selezionare i campioni da elaborare.
 4. Selezionare un metodo di trattamento in uno dei modi seguenti:
 - Fare clic su **Browse** e selezionare un metodo di trattamento, quindi fare clic su **Open**
 - Fare clic su **New** e creare il nuovo metodo di trattamento. Fare riferimento alla sezione: [Creazione di un metodo di trattamento](#).
 5. (Opzionale) Fare clic su **Edit** per modificare il metodo di trattamento. Fare riferimento alla sezione: [Creazione di un metodo di trattamento](#).
 6. Selezionare un campione di confronto per i flussi di lavoro non mirati.
 7. Fare clic su **Process**.
-

Nota: nell'analisi non mirata, viene eseguito il raggruppamento automatico per addotto. L'algoritmo di raggruppamento assegna i modificatori degli addotti per i composti con lo stesso tempo di ritenzione se la differenza di massa tra loro è associata a un addotto comune. Tale funzione evita l'esame di composti duplicati con addotti con cariche differenti.

Se i dati contengono colonne di lotti personalizzate che hanno lo stesso nome delle colonne predefinite della Results Table o di formule esistenti, viene visualizzato un

messaggio di avviso. Fare clic su **OK** per continuare. All'inizio di questi nomi di colonna viene aggiunto un carattere di sottolineatura ().

8. Per mostrare o nascondere i tipi di campioni, fare clic sull'icona Filter (▼) nella colonna **Sample Type** e selezionare o deselezionare le caselle di controllo richieste.
9. Per impostare i filtri di accettazione, fare clic sull'icona Filter (▼) su una qualsiasi colonna Acceptance, selezionare **Filter by Flag**, quindi selezionare **Pass** o **Fail**.


Nota: Le colonne Acceptance includono **Accuracy**, **Accuracy Acceptance**, **Asymmetry Factor**, **Calculated Concentration**, **Concentration Acceptance**, **Integration Acceptance**, **Quality Retention Time Delta (min)**, **Retention Time Error (%)** e **Total Width**.

10. Per selezionare i filtri di confidenza qualitativa, fare clic sul semaforo **Confidence** e selezionare o deselezionare le caselle di controllo richieste.

Nota: dopo la generazione della Results Table utilizzando l'algoritmo AutoPeak, se l'utente modifica l'ampiezza XIC e l'RT previsto, i dati vengono rielaborati utilizzando il precedente modello di algoritmo a meno che l'utente non aggiorni il modello utilizzando nuovi valori per l'ampiezza XIC e l'RT atteso.

11. Per filtrare in base a singoli valori per una colonna della Results Table, fare clic sull'icona Filter (▼) nell'intestazione della colonna e selezionare le caselle di controllo per i valori da mostrare nella Results Table.

Suggerimento! Per applicare filtri personalizzati aggiuntivi, selezionare **Text Filters**.

Suggerimento! Per riapplicare il filtro dopo una modifica alla Results Table, quale ad esempio una modifica al conteggio dell'area, fare clic su **Reapply Filter** ()

12. Salvare il file Results in uno dei modi seguenti:

- Fare clic su **Results > Save**.
- Per evitare modifiche alla Results Table, fare clic su **Results > Lock results file and save**.

Aggiunta di campioni




Prerequisiti
<ul style="list-style-type: none"> • Nell'area di lavoro Analytics, una Results Table è aperta.

Questa opzione aggiunge altri campioni a una Results Table attualmente attiva.

1. Fare clic su **More > Add samples**.
2. Nella finestra di dialogo Select Samples, selezionare i campioni richiesti.

Istruzioni operative - Elaborazione

- Il riquadro Available mostra le sottocartelle, i file wiff2 e i campioni disponibili nella cartella **Data** per il progetto corrente.
- Espandere le singole cartelle per visualizzare eventuali sottocartelle o file wiff2. Se il file wiff2 viene espanso, si apre per mostrare i campioni disponibili.

- Usare le frecce per aggiungere () o rimuovere () i campioni.
- Selezionare i campioni come segue:
 - Fare doppio clic su un campione singolo.
 - Selezionare un campione o file di dati e fare clic su  .
 - Trascinare un campione o file di dati dal riquadro a sinistra a quello a destra.

Premere **Shift** o **Ctrl** per selezionare più file o campioni prima di spostarli.

3. Fare clic su **OK**.

Appare una barra di progressione mentre i nuovi campioni vengono integrati e aggiunti alla tabella esistente.

Personalizzazione della Results Table

Prerequisiti

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Nell'area di lavoro Analytics, una Results Table è aperta. |
|--|

Selezionare il formato numerico e le colonne da mostrare nella Results Table. Le impostazioni delle colonne possono essere applicate a tutte le Results Tables del progetto.

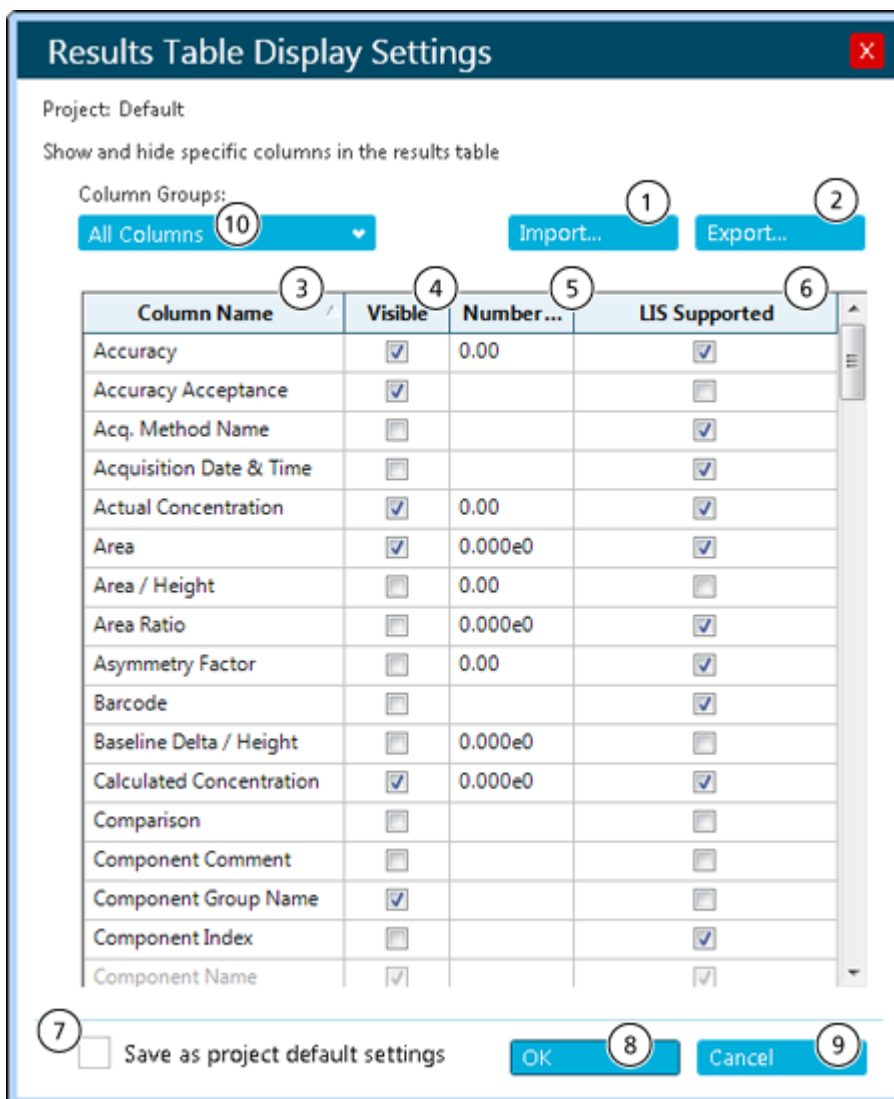
Nota: Alcune colonne critiche come **Sample Name**, **Sample ID**, **Barcode** e così via non devono essere nascoste quando gli utenti personalizzano le impostazioni delle colonne della Results Table.

Suggerimento! Se i nomi di colonna sono troncati, spostare il cursore sopra il campo per mostrare il nome della colonna in una descrizione comando.

1. Fare clic su **More > Table display settings**.

Viene visualizzata la finestra di dialogo Results Table Display Settings. Per una descrizione delle colonne nella Results Table, fare riferimento alla sezione: [Colonne della Results Table](#).

Figura 6-23: Finestra di dialogo Results Table Display Settings (Impostazioni di visualizzazione della Results Table)



Elemento	Descrizione
1	Fare clic per selezionare un file di impostazione colonne precedentemente salvato utilizzando il pulsante Export. I campi della finestra di dialogo vengono aggiornati per utilizzare le informazioni ottenute dal file selezionato.
2	Fare clic per salvare le attuali impostazioni della finestra di dialogo in un file. Utilizzare il pulsante Import per importare e utilizzare queste impostazioni. Questa opzione consente all'utente di selezionare alternativamente diverse disposizioni delle colonne.

Istruzioni operative - Elaborazione

Elemento	Descrizione
3	Il nome delle colonne visualizzato in ordine alfabetico. Nota: Questo elenco include anche qualsiasi colonna calcolata definita nel metodo di trattamento utilizzato per creare la Results Table.
4	Un segno di spunta indica che la colonna è visibile.
5	Per i campi numerici, usare il formato 0.00 per le notazioni non scientifiche e il formato 0.00e0 per le notazioni scientifiche. Modificare i punti decimali per indicare la precisione dei numeri mostrati. Come separatore decimale è possibile utilizzare solo il punto "." può essere utilizzato come separatore decimale. Nota: Il raggruppamento dei numeri non è supportato.
6	Le righe LIS Supported selezionate sono predefinite da LIMS e le selezioni delle colonne non possono essere modificate.
7	Fare clic per utilizzare le impostazioni delle colonne nelle future Results Tables.
8	Fare clic per applicare le modifiche e chiudere la finestra di dialogo.
9	Fare clic per annullare le modifiche e chiudere la finestra di dialogo.
10	Selezionare una categoria di colonne della Results Table. Gli utenti possono filtrare le colonne visualizzate nella Results Table in base alla selezione. La selezione di una categoria aiuta l'utente a trovare facilmente una colonna nella Results Table.

2. Selezionare o deselezionare la casella di controllo nella colonna **Visible**, come richiesto.

Nota: Oltre alle colonne descritte nella sezione [Colonne della Results Table](#), la Results Table può contenere colonne calcolate e di testo personalizzate. Le colonne calcolate sono identificate da un asterisco.

3. (Opzionale) Nella colonna **Number Format**, modificare il formato in numero intero o notazione scientifica.
4. (Opzionale) Nella colonna **Number Format**, modificare il numero di punti decimali da mostrare.
5. Fare clic su **OK**.
Le nuove impostazioni saranno applicate alle Results Table. Le impostazioni sono anche salvate e applicate quando viene creata una nuova Results Table o viene riaperta una Results Table salvata in precedenza.

Suggerimento! Utilizzare la riga dell'intestazione della Results Table per regolare le larghezze e l'ordine delle colonne. Trascinare l'intestazione per modificare la larghezza. Trascinare l'intestazione della colonna in un'altra posizione nella Results Table per modificare l'ordine della colonna. Fare clic sull'icona del filtro (▼) sull'intestazione di una colonna per applicare un filtro alla colonna. Quando si utilizza il pulsante **Export** per esportare una Results Table, la larghezza della colonna, l'ordine e le impostazioni del filtro vengono salvati nel file esportato.

Creazione di un report

Prerequisiti

- Nell'area di lavoro Analytics, una Results Table è aperta.

Suggerimento! Per selezionare gli analiti da includere in un report, utilizzare la colonna **Reportable** nella Results Table. Fare riferimento alla sezione: [Colonne della Results Table](#).

1. Fare clic su **Reporting > Create Report and Save Results Table**. Viene visualizzata la finestra di dialogo Create Report.
2. Selezionare un modello dall'elenco **Template name**.
3. Selezionare un formato del report.
4. Per modificare il nome file e la posizione, fare clic su **Browse**, spostarsi su una posizione diversa, inserire un **File name** e quindi fare clic su **Save**.

Nota: Per impostazione predefinita, i rapporti vengono salvati in
ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter\Reports.

5. Fare clic sulla casella di controllo **Create an individual report for each sample**, se richiesto.
6. (Opzionale) Selezionare un logo diverso per il report:
 - a. Fare clic su **Replace Logo**.
 - b. Utilizzare le opzioni nella finestra di dialogo Replace Logo per modificare il logo come richiesto.
 - c. Fare clic su **Save**.
 - d. Fare clic su **Cancel**.
7. Fare clic su **View Pages** per visualizzare il layout del report.
8. Fare clic su **Create**.

Suggerimento! Per indicare i risultati selezionati utilizzando un modello quale Per Sample Quant, Per Sample Qual, Per Sample Visible Rows Using Visible Analytes o Positive Hits Qual, utilizzare i filtri o nascondere le righe non desiderate nella Results Table.

Suggerimento! Fare clic sull'esempio in **Template View** nella finestra di dialogo Create Report per visualizzare il layout del modello di report. Per visualizzare un modello specifico, è necessario avere un file jpg con lo stesso nome del modello oltre al suffisso [Snapshot_X], dove la X corrisponde al numero dell'immagine nella sequenza. Non utilizzare spazi tra il nome file e il suffisso.

Ad esempio, il modello All Peaks Qual.docx potrebbe essere denominato come:
All Peaks Qual[Snapshot_1].jpg, All Peaks Qual[Snapshot_2].JPG, All Peaks Qual[Snapshot_3].jpg.

Esportazione e salvataggio di una Results Table

Prerequisiti
<ul style="list-style-type: none">Nell'area di lavoro Analytics, una Results Table è aperta.

Suggerimento! Per selezionare gli analiti da esportare, utilizzare la colonna **Reportable** nella Results Table. Fare riferimento alla sezione: [Colonne della Results Table](#).

- Fare clic su **Reporting > Export results > Export and save Results Table**.
Si apre la finestra di dialogo Export.
- Selezionare le opzioni secondo necessità.
Per le descrizioni delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida online*.
- Fare clic su **OK**.

Esportazione di Results Table – Metric

Prerequisiti
<ul style="list-style-type: none">Nell'area di lavoro Analytics, una Results Table è aperta.

Nota: Il produttore declina qualsiasi responsabilità e passività potenziale, compresi danni indiretti o consequenziali, una volta che i dati sono stati esportati dall'area di lavoro Analytics.

L'esportazione delle Results Table è uno dei metodi controllati per l'output di dati nell'area di lavoro Analytics.

Questa funzione viene utilizzata per creare un file di testo delimitato da tabulazioni contenente le informazioni della Results Table attiva. Le informazioni vengono esportate per tutti i campioni e o per tutti i componenti o solo per i componenti visibili per la metrica o il campo selezionati.

- Fare clic su **Reporting > Export results > Results Table - Metric**.
Viene aperta la finestra di dialogo Export Metric.

2. Selezionare la colonna da esportare nel campo **Metric**, quindi impostare le opzioni. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.
3. Fare clic su **OK**.

Trasferimento dei risultati a Watson LIMS

Prerequisiti
<ul style="list-style-type: none">• Una Results Table è aperta e bloccata.• Il software Watson LIMS è aperto.

Nota: Viene trasferito un sottoinsieme di colonne della Results Table, incluse alcune colonne nascoste, e alcune colonne non sono designate come **Reportable**.

1. Fare clic su **Reporting > Initiate Transfer to Watson LIMS**.
Si apre la finestra di dialogo di trasferimento.
2. Nel software Watson LIMS, importare i dati.
3. Nella finestra di dialogo di trasferimento in SCIEX OS, eseguire una delle operazioni seguenti:
 - Se il trasferimento viene completato correttamente, fare clic su **Confirm**.
 - Se il trasferimento non viene completato correttamente, fare clic su **Decline**.

Trasferimento dei risultati in un altro sistema LIMS

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Configurare LIMS nell'area di lavoro Configuration. Fare riferimento alla sezione: Impostazioni per il sistema di gestione delle informazioni di laboratorio (LIMS).• Aprire una Results Table bloccata.

Suggerimento! Per selezionare gli analiti da esportare, utilizzare la colonna **Reportable** nella Results Table. Fare riferimento alla sezione: [Colonne della Results Table](#).

1. Fare clic su **Reporting > Transfer Results to LIMS**.
Si apre la finestra di dialogo LIMS Transfer.
2. Selezionare un modello dall'elenco **Template**.
3. Fare clic su **Transfer**.

Lavorare con le Results Table

Le Results Table riassumono la concentrazione calcolata di un analita, nonché i risultati dell'analisi qualitativa quali riscontri di libreria, risultati di Formula Finder e così via, in ogni campione sconosciuto in base alla curva di calibrazione. Le Results Table comprendono

Istruzioni operative - Elaborazione

anche le curve di calibrazione e le statistiche relative ai risultati. L'utente può personalizzare le Results Table, nonché visualizzarle in una certa disposizione.

Nota: Le colonne della Results Table con un asterisco (*) sono colonne di testo o colonne calcolate personalizzate.

È possibile esportare i dati dalla Results Table su un file di testo per l'utilizzo in altre applicazioni, come Microsoft Excel. L'utente può esportare tutti i dati contenuti nella Results Table o solo i dati contenuti nelle colonne visibili.

Suggerimento! Se più sessioni delle Results Table sono state affiancate verticalmente o orizzontalmente, fare clic su **Views > Reset layout** per ripristinare il layout originale delle Results Table.

Utilizzare il menu pulsante destro per modificare le righe della Results Table. Per mostrare questo menu, fare clic con il pulsante destro del mouse in qualsiasi punto della Results Table.

Figura 6-24: Menu pulsante destro del mouse

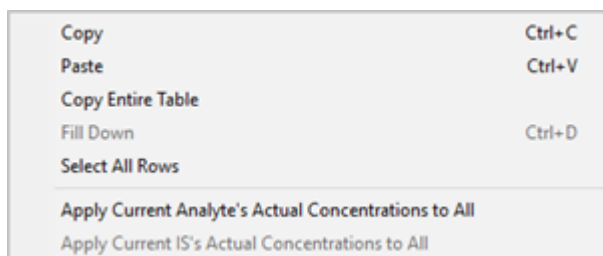


Tabella 6-4: Comandi del menu pulsante destro del mouse

Etichetta	Descrizione
Copy	(Copia) Usare questa opzione per copiare i dati attuali negli appunti.
Paste	(Incolla) Usare questa opzione per incollare i dati dagli appunti nella visualizzazione attuale.
Copy Entire Table	(Copia intera tabella) Usare questa opzione per copiare l'intera tabella negli appunti.
Fill Down	(Ricopia in basso) (Componenti) Usare questa opzione per copiare le informazioni della prima riga selezionata in tutte le righe selezionate successive.
Select All Rows	(Seleziona tutte le righe) Usare questa opzione per selezionare tutte le righe presenti nella Results Table attualmente attiva. È utile se l'utente vuole in seguito applicare un comando, ad esempio Copy , che agisce sulle righe selezionate.

Tabella 6-4: Comandi del menu pulsante destro del mouse (continua)

Etichetta	Descrizione
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	<p>(Applica le concentrazioni effettive dell'analita corrente a tutto) (Analiti) Nel caso in cui ci sia più di un analita e tutti gli analiti siano presenti nei campioni alla stessa concentrazione, usare questa opzione per fornire una scelta rapida per impostare il campo di concentrazione effettiva per tutti gli analiti dei campioni Standard. Per utilizzare questa opzione:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Usare il Components and Groups List per visualizzare solo un analita specifico nella tabella. Fare riferimento alla sezione: Elenco dei componenti e dei gruppi. 2. (Opzionale) Filtrare la colonna Sample Type per visualizzare solo i campioni Standard. 3. Specificare la concentrazione reale dell'analita, digitando all'interno delle celle oppure selezionando la colonna e incollando il testo al suo interno. 4. Selezionare Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All. <p>Ritornare alla visualizzazione di tutti i componenti e tipi di campione, secondo necessità.</p>
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	<p>(Applica le concentrazioni effettive dell'IS corrente a tutto) (Standard interni) Nel caso in cui ci sia più di uno standard interno e tutti gli standard interni siano presenti nei campioni alla stessa concentrazione, usare questa opzione per fornire una scelta rapida per impostare il campo di concentrazione effettiva per tutti gli standard interni dei campioni Standard. Per utilizzare questa opzione:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Usare il Components and Groups List per visualizzare solo uno standard interno specifico nella tabella. Fare riferimento alla sezione: Elenco dei componenti e dei gruppi. 2. (Opzionale) Filtrare la colonna Sample Type per visualizzare solo i campioni Standard. 3. Specificare la concentrazione effettiva per lo standard interno, digitando all'interno delle celle oppure selezionando la colonna e incollando il testo al suo interno. 4. Selezionare Apply Current IS's Actual Concentrations to All. <p>Ritornare alla visualizzazione di tutti i componenti e tipi di campione, secondo necessità.</p>

Filtri delle Results Table

Utilizzare il campi nella parte superiore della Results Table per visualizzare e filtrare il contenuto.

Figura 6-25: Controlli di filtro



Tabella 6-5: Filtri delle Results Table

Etichetta	Descrizione
x of y rows	(x di y righe) Mostra il numero di righe visibili (x) rispetto al numero totale di righe (y).
Filters	(Filtri) Mostra il numero di colonne a cui sono applicati i filtri.
Qualify for Rules Filters	(Qualifica per filtri regole) Alterna la visualizzazione della Results Table tra quella con le righe che corrispondono ai filtri dei criteri di accettazione o ai filtri del semaforo di confidenza e quella con le righe che non corrispondono a tali filtri. I criteri di accettazione e i semafori di confidenza vengono applicati nel metodo di trattamento.
Reapply Filter	(Riapplica filtro) Riapplica il filtro dopo una modifica alla Results Table, quale ad esempio una modifica al conteggio dell'area. Nota: tutti i filtri vengono riapplicati automaticamente quando viene aggiunto o modificato un altro filtro.
Clear	(Cancella) Cancella tutti i filtri

Colonne della Results Table

Nota:

- Le colonne con un asterisco (*) sono colonne di testo personalizzate, colonne calcolate o colonne create come risultato di una regola di segnalazione combinata.
- Le colonne con nomi che iniziano con un carattere di sottolineatura (_) sono colonne del lotto personalizzate che hanno lo stesso nome di una colonna predefinita della Results Table o di una formula.
- La colonna **Format** indica il modo in cui il campo viene convalidato nelle formule.
- Nelle colonne che contengono numeri, gli utenti possono modificare il formato numerico e il numero di cifre significative. Scegliere tra **Decimal**, **Significant Digits** o **Scientific Notation** nella colonna **Number Format**, quindi digitare il numero di cifre significative nella colonna **Number Format Precision** nella finestra di dialogo Results Table Display Settings.

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Accuracy	(Precisione) Mostra la precisione degli standard e i campioni di controllo qualità. Per gli altri tipi di campioni, questo valore è impostato su N/A . Per gli standard di concentrazione nota, la precisione degli standard e dei campioni QC è definita come $100\% \times (\text{Calculated Concentration})/(\text{Actual Concentration})$.	Numero	Sì
Accuracy Acceptance	(Accettazione della precisione) Mostra lo stato di accettazione della precisione.	Testo	No
Acq. Method Name	(Nome del metodo di acquisizione) Mostra il nome del metodo di acquisizione utilizzato per acquisire il campione.	Testo	Sì
Acquisition Date & Time	(Data e ora di acquisizione) Mostra la data e l'ora in cui è stato acquisito il campione.	Testo	Sì
Actual Concentration	(Concentrazione effettiva) Per gli standard e i campioni QC, mostra la concentrazione nota prevista.	Numero	Sì

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Adduct/ Charge	(Addotto/Carica) Mostra l'addotto o lo stato di carica del composto. Nel flusso di lavoro mirato, questo valore viene impostato dall'utente. Nel flusso di lavoro non mirato, questo valore viene automaticamente impostato dal software se è abilitato il raggruppamento per addotto.	Testo	No
Area	(Area) Mostra l'area di picco rilevata. Se non viene rilevato alcun picco, tale valore viene impostato su N/A .	Numero	Sì
Area / Height	(Area/Altezza) Mostra l'area di picco rilevata divisa per l'altezza. Se un picco non viene rilevato, tale valore viene impostato su N/A .	Numero	No
Area Ratio	(Rapporto area) Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, mostra il rapporto di Area dell'analita rispetto a IS Area . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	Sì
Area Ratio of comparison	<p>(Rapporto area di confronto) Mostra il rapporto area del campione/campione di controllo.</p> <ul style="list-style-type: none"> Se non si trovano picchi nel controllo, il valore è N/A. Se non si trovano picchi nel campione, il valore è 0. Se ogni picco nel campione è inferiore ad Area Ratio Threshold, il valore è N/A. Se non si utilizza alcun campione di confronto, il valore è No control sample (Nessun campione di controllo). Per il campione di controllo, il rapporto di area per i picchi trovati è sempre 1. <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Asymmetry Factor	(Fattore di asimmetria) Mostra la distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza posteriore divisa per la distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza anteriore, con tutte le misurazioni eseguite al 10% dell'altezza massima del picco.	Numero	Sì
AutoPeak Asymmetry	(Asimmetria AutoPeak) Mostra il rapporto di asimmetria del picco integrato rispetto alla simmetria prevista basata sul modello. Un rapporto di 1 indica un buon adattamento. Se il valore non è 1, la sorgente di ionizzazione potrebbe essere satura o l'integrazione potrebbe non essere corretta. Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.	Numero	No
AutoPeak Candidate Model Quality	(Qualità modello candidato AutoPeak) Mostra l'idoneità del picco per l'utilizzo nella creazione di un modello di picco. Se il valore è significativamente maggiore di 1, il campione utilizzato per creare il metodo di quantificazione non è adatto. Utilizzare un picco con una risposta più ampia per creare il modello e applicarlo a tutti i campioni. Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.	Numero	No
AutoPeak Group Confidence	(Confidenza gruppo AutoPeak) Indica la probabilità che il gruppo di picchi reali sia integrato e che l'integrazione non includa un picco di rumore positivo falso. Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.	Numero	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
AutoPeak Integration Quality	<p>(Qualità integrazione AutoPeak) Mostra la qualità dei dati. La qualità è rappresentata da un valore da 0 a 1. Se la qualità è inferiore a 0,6, analizzare ulteriormente l'integrazione.</p> <p>Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.</p>	Numero	No
AutoPeak Model Source	<p>(Origine modello AutoPeak) Mostra i nomi dei campioni e dei componenti che sono stati utilizzati per la modellazione di picco. Se il componente utilizzato per la modellazione non è uguale al componente che è stato integrato, verificare che il modello sia appropriato.</p> <p>Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.</p>	Numero	No
AutoPeak Num Peaks	<p>(Numero di picchi AutoPeak) Mostra il numero di picchi convoluti adiacenti rilevati dall'algoritmo.</p> <p>Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.</p>	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
AutoPeak Peak Width Confidence	<p>(Confidenza ampiezza del picco AutoPeak) Mostra il livello di confidenza nell'ampiezza del picco. Il valore 1 indica che l'ampiezza del picco effettivo e l'ampiezza del picco prevista sono uguali. Un valore superiore a 1 indica che la larghezza del picco effettiva è maggiore della larghezza del picco prevista. Un valore inferiore a 1 indica che l'ampiezza del picco effettiva è inferiore all'ampiezza del picco prevista o che il picco è più ampio a causa di una modifica delle condizioni cromatografiche.</p> <p>Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.</p>	Numero	No
AutoPeak Saturated acc	<p>(AutoPeak saturato) Se è stata usata l'opzione Saturation correction e il picco corrispondente è stato saturato, per cui il modello adattato si estende oltre il picco, questo campo contiene il valore Yes (Sì). Diversamente la colonna risulta vuota. Se la precisione e i CV% per i campioni a concentrazioni maggiori non rientrano nell'intervallo accettabile, sarà necessario regolare la Saturation correction</p> <p>Applicabile solo ai metodi di trattamento che utilizzano l'algoritmo di integrazione AutoPeak.</p>	Testo	No
Barcode	<p>(Codice a barre) Mostra l'ID univoco per un campione. L'ID univoco viene inizializzato dal valore originariamente specificato nel lotto utilizzato per acquisire i dati.</p> <p>Barcode può contenere fino a 20 caratteri. Barcode non può contenere i seguenti caratteri: \ / : * ? " < > = o caratteri da 0 a 31 della tabella ASCII.</p>	Testo	Sì

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Baseline Delta/ Height	(Delta/Altezza linea di base) Mostra il valore assoluto della differenza di altezza della linea di base, all'inizio e alla fine del picco, rispetto all'altezza del picco reale. I valori maggiori di 0,1 indicano che la linea di base potrebbe non essere stata integrata correttamente e che il picco deve essere revisionato.	Numero	No
Calculated Concentration	(Concentrazione calcolata) Per standard con concentrazione nota, mostra il valore della concentrazione retrocalcolata dalla curva di calibrazione. Le equazioni di regressione descrivono in che modo la regressione viene eseguita per i vari tipi di regressione e pesatura.	Numero	Si
Combined Score	(Punteggio combinato) (Opzionale) Mostra il punteggio in un unico numero che può essere utilizzato per scopi di confronto relativi. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	No
Comparison	(Confronto) Mostra i componenti nel campione di confronto.	Numero	No
Component Comment	(Commento componente) Mostra un commento arbitrario per l'analita o lo standard interno applicabile a tutti i campioni.	Testo	No
Component Group Name	(Nome gruppo componente) Mostra qualsiasi nome di gruppo associato all'analita o allo standard interno.	Testo	No
Component Index	(Indice componente) Mostra l'indice dell'analita o dello standard interno nel metodo di trattamento originale.	Numero	Si

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Component Name	<p>(Nome componente) Mostra il nome dell'analita o dello standard interno.</p> <p>Questa colonna è sempre visibile nella Results Table. Nella finestra di dialogo Column Settings la casella di controllo non è disponibile.</p> <p>Il Component Name può contenere fino a 50 caratteri.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Il Component Name può essere modificato solo nel metodo di trattamento e non nella Results Table. • Questa colonna è obbligatoria per il trasferimento di un sistema LIMS (Laboratory Information Management System). 	Testo	Si
Component Type	(Tipo di componente) Mostra il tipo di analita: Quantifier, Qualifier o Internal Standard.	Testo	No
Conc. Units	(Unità di concentrazione) Mostra le unità di concentrazione.	Testo	Si
Concentration Acceptance	(Accettazione della concentrazione) Mostra lo stato di accettazione della concentrazione calcolata.	Numero	No
Concentration Ratio	(Rapporto di concentrazione) Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, mostra il rapporto di Actual Concentration rispetto a IS Actual Concentration . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
Difference from Average Sample Time	(Differenza dal tempo campione medio) Mostra la differenza tra il tempo di analisi per questo campione e il tempo di analisi medio per tutti i campioni.	Numero	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Dilution Factor	(Fattore di diluizione) Mostra il fattore per il quale il campione è stato diluito. Questo fattore è utilizzato nel calcolo della curva di calibrazione.	Numero	Sì
End Time	(Tempo finale) Mostra il tempo di ritenzione finale del picco rilevato, in minuti.	Numero	Sì
End Time at 10%	(Tempo finale al 10%) Mostra il tempo in minuti lungo il lato posteriore del picco dove l'intensità è al 10% dell'altezza di picco.	Numero	No
End Time at 5%	(Tempo finale al 5%) Mostra il tempo in minuti lungo il lato posteriore del picco dove l'intensità è al 5% dell'altezza di picco.	Numero	No
Expected Ion Ratio	(Rapporto di ioni previsto) Mostra il rapporto di ioni previsto per campioni sconosciuti, QC e standard. Per ogni componente in un gruppo, Expected Ion Ratio è la media dei rapporti ionici dei suoi standard. Uno standard non è incluso nel calcolo di Expected Ion Ratio del componente in presenza delle seguenti condizioni: 1. L'area del picco è N/A. 2. La colonna Use non è selezionata.	Numero	Sì
Expected RT	(RT previsto) Mostra il tempo di ritenzione previsto originale del metodo di trattamento, in minuti.	Numero	Sì
Expected MW	(Peso molecolare previsto) Mostra il peso molecolare previsto originale del metodo di trattamento, in Da. Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.	Numero	Sì

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Formula	(Formula) (Opzionale) Mostra una formula chimica valida. Se la formula chimica non è valida, non viene memorizzata dal software. Se la formula chimica è valida, le colonne Mass (Da) e Isotope vengono riempite automaticamente.	Testo	Sì
Formula Confidence	(Confidenza formula) Mostra il livello di confidenza in Formula Finder Score come percentuale. Viene calcolata in base a: <ul style="list-style-type: none"> • Corrispondenza tra lo spettro MS corrente e lo spettro teorico per il composto, in base alla massa. • Corrispondenza tra lo spettro MS/MS acquisito e lo spettro MS/MS trovato nel database del software LibraryView. <p>Il punteggio dello spettro MS presenta un peso doppio rispetto al punteggio dello spettro MS/MS.</p> <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Testo	No
Formula Finder	(Rilevatore della formula) Mostra il punteggio in un unico numero che può essere utilizzato per scopi di confronto pertinenti. Il valore può essere aggiornato utilizzando i dati dalla Results Table del rilevatore della formula per la verifica dei picchi. <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Numero	No
Formula Finder Results	(Risultati rilevatore della formula) (Opzionale) Mostra il migliore abbinamento dei risultati del punteggio del rilevatore della formula. <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Testo	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Formula Finder Score	(Punteggio rilevatore della formula) (Opzionale) Mostra il punteggio in un unico numero che può essere utilizzato per scopi di confronto relativi.	Numero	Si
Found at Fragment	(Trovato al frammento) (Opzionale) Mostra la migliore massa di frammento (Da) richiesta su cui sono stati rilevati gli spettri corrispondenti. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	Si
Found at Mass	(Trovato a massa) (Opzionale) Mostra la migliore massa di estrazione (Da) richiesta su cui sono stati rilevati gli spettri corrispondenti. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	Si
Fragment Mass	(Massa di frammento) (Opzionale) Mostra la massa di frammento, come specificato nel metodo. Il precursore del frammento viene estratto da MS/MS nella colonna Extraction Mass (Da) . Quando fornito, questo valore deve essere numerico.	Numero	Si
Fragment Mass Error (ppm)	(Errore massa di frammento (ppm)) (Opzionale) Mostra la differenza tra Found at Fragment e Fragment Mass, in ppm.	Numero	Si
Fragment Mass Error (mDa)	(Errore massa di frammento (mDa)) (Opzionale) Mostra la differenza tra Found at Fragment e Fragment Mass, in mDa.	Numero	Si
Fragment Mass Error Confidence	(Confidenza errore massa di frammento) (Opzionale) Mostra il livello di confidenza nell'errore di massa del frammento.	Testo	Si
Height	(Altezza) Mostra l'altezza del picco rilevata. Se un picco non viene rilevato, tale valore viene impostato su N/A .	Numero	Si

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Height Ratio	(Rapporto altezza) Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, mostra il rapporto di Height rispetto a IS Height . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	Sì
Index	(Indice) Mostra l'indice della riga nell'ordine originale non ordinato. Se la tabella è ordinata sulla base di un'altra colonna, può essere riportata all'ordine originale eseguendo l'ordinamento su questa colonna.	Numero	No
Injection Volume	(Volume di iniezione) Mostra il volume del campione memorizzato nel metodo e iniettato dall'autocampionatore.	Numero	Sì
Integration Acceptance	(Accettazione integrazione) Mostra il grado di conformità dell'integrazione dei picchi ai criteri di accettazione. Viene calcolata in base a questi fattori, come configurati nelle regole di segnalazione: <ul style="list-style-type: none"> • Qualità di integrazione • Fattore di asimmetria • Larghezza totale picco, in minuti • Errore tempo di ritenzione, misurato come percentuale o in minuti 	Numero	No
Integration Type	(Tipo di integrazione) Mostra il tipo di integrazione. <ul style="list-style-type: none"> • Baseline: un picco indipendente è stato integrato nel modo consueto. • Valley: indica che erano presenti due picchi adiacenti e che il segnale non è ritornato al valore della linea di base tra di essi. • N/A: indica che non è stato rilevato alcun picco. • Manual: indica che il picco è stato integrato manualmente. 	Testo	Sì

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Ion Ratio	<p>(Rapporto ionico) Mostra il rapporto ionico. I rapporti ionici vengono determinati quando almeno due transizioni MRM di un singolo analita sono state raccolte in un gruppo.</p> <p>Tutti gli analiti di un gruppo costituiscono un sottogruppo Analyte. Tutti gli standard interni di un gruppo costituiscono un sottogruppo IS. Il primo componente in un sottogruppo è utilizzato come ione Quantifier. Il resto dei componenti del sottogruppo viene utilizzato come ioni Qualifier.</p> <p><i>Rapporto ionico = (Area picco o Altezza del qualificatore)/(Area picco o Altezza del quantificatore)</i></p> <p>Il rapporto ionico può essere calcolato per l'area di picco o per l'altezza di picco. Se si utilizza l'area nel metodo di trattamento per la regressione del primo componente, ossia il componente il cui indice è 1, nella Results Table, l'area di picco sarà utilizzata per il calcolo del rapporto ionico per tutta la Results Table. Se si utilizza l'altezza nella regressione del primo componente, per il calcolo verrà utilizzata l'altezza di picco.</p> <ul style="list-style-type: none">• Se un componente non fa parte di un gruppo, il valore Ion Ratio è impostato su N/A.• Se il picco non viene rilevato, il valore Ion Ratio è impostato su N/A.• Se il rapporto ionico è applicato a tutti i componenti nei sottogruppi sia Analyte che IS, il Qualifier è il Quantifier.• Se l'integrazione cambia per i picchi Quantifier o Qualifier, il rapporto ionico viene calcolato nuovamente.	Numero	Sì

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
	<p>Nota: l'utente può definire le regole di segnalazione per il rapporto ionico nel metodo di trattamento.</p>		
Ion Ratio Acceptance	(Accettazione rapporto ionico) Mostra lo stato di accettazione del rapporto ionico.	Numero	No
Ion Ratio Confidence	(Confidenza rapporto ionico) Mostra il livello di confidenza nel rapporto ionico. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Testo	No
IS	<p>(Standard interno) Mostra se la riga è uno standard interno. Una casella di controllo selezionata indica che il componente della riga è uno standard interno, non un analita.</p> <p>Nota: La casella di controllo IS viene selezionata automaticamente per i nomi dei campioni contenenti .heavy o -cis perché questi campioni sono definiti come standard interni nei flussi di lavoro proteomici. Per altri flussi di lavoro, non sono standard interni, pertanto la casella di controllo IS deve essere deselezionata.</p>	Numero	No
IS Actual Concentration	(Concentrazione effettiva IS) Mostra la concentrazione effettiva per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Area	(Area IS) Mostra l'area per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
IS Area / Height	(Area/Altezza IS) Mostra il rapporto tra IS Area e IS Height per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Baseline Delta / Height	(Delta/Altezza linea di base IS) Mostra il valore assoluto della differenza di altezza tra la linea di base, all'inizio e alla fine del picco, e l'altezza del picco reale per lo standard interno. I valori maggiori di 0,1 indicano che la linea di base potrebbe non essere stata integrata correttamente e che il picco deve essere revisionato.	Numero	No
IS Comment	(Commento IS) Mostra un commento arbitrario per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Testo	No
IS End Time	(Tempo finale IS) Mostra il tempo in cui l'acquisizione termina per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Expected MW	(Peso molecolare previsto IS) Mostra il peso molecolare previsto per lo standard interno associato all'analita corrente, in Da. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A . Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.	Numero	Si
IS Expected RT	(Tempo di ritenzione previsto IS) Mostra il tempo di ritenzione previsto per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
IS Height	(Altezza IS) Mostra l'altezza per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Integration Type	(Tipo di integrazione IS) Mostra il tipo di integrazione per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Testo	No
IS Mass Info	(Info massa IS) Mostra le informazioni sulla massa per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Testo	No
IS MW	(Peso molecolare IS) Mostra il peso molecolare trovato per lo standard interno associato all'analita corrente, in Da. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A . Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.	Numero	No
IS MW Delta (Da)	(Delta MW IS (Da)) Mostra la differenza tra il peso molecolare previsto e trovato per lo standard interno, in Da. Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.	Numero	Si
IS MW Delta (ppm)	(Delta MW IS (ppm)) Mostra la differenza tra il peso molecolare previsto e trovato per lo standard interno, in ppm. Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.	Numero	Si

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
IS Name	(Nome IS) Mostra il nome dello standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Testo	No
IS Peak Comment	(Commento picco IS) Mostra il commento sul picco per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Testo	No
IS Quality	(Qualità IS) Mostra la qualità dello standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Region Height	(Altezza area IS) Mostra l'altezza per l'area dello standard interno. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Retention Time	(Tempo di ritenzione IS) Mostra il tempo di ritenzione per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Signal / Noise	(Segnale/Rumore IS) Mostra il rapporto segnale-rumore per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Start Time	(Ora di inizio IS) Mostra l'ora di inizio per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
IS Total Width	(Larghezza totale IS) Mostra la larghezza totale per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
IS Width at 50%	(Larghezza IS al 50%) Mostra la larghezza al 50% per lo standard interno associato all'analita corrente. Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	No
Isotope Confidence	(Confidenza isotopo) Mostra il livello di confidenza nel rapporto isotopico. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Testo	No
Isotope Ratio Difference	(Rapporto isotopico) Identifica la differenza tra lo schema isotopi teorico, basato sulla formula, e lo schema isotopi degli spettri acquisiti. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	No
LC Method	(Metodo LC) Mostra il nome del metodo LC utilizzato per acquisire il campione.	Testo	No
Library Confidence	(Confidenza libreria) Mostra il livello di confidenza in Library Hit in base a Library Score del risultato. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Testo	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Library Hit	<p>(Risultato libreria) Mostra il nome del composto della migliore corrispondenza della libreria, ovvero il composto con il maggiore punteggio di purezza e con la formula corrispondente a quella richiesta.</p> <p>Il valore può essere aggiornato utilizzando i dati dalla griglia dei risultati di ricerca della libreria di verifica dei picchi. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Testo	No
Library Score	<p>(Punteggio libreria) Mostra quanto la corrispondenza della libreria si adatta perfettamente alla massa trovata.</p> <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Numero	No
Mass Error (ppm)	<p>(Errore di massa (ppm)) Mostra la differenza tra la massa trovata e la massa di estrazione, espressa in parti per milione.</p> <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Numero	No
Mass Error (mDa)	<p>(Errore di massa (mDa)) Mostra la differenza tra la massa trovata e la massa di estrazione, espressa in milliDaltons.</p> <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Numero	No
Mass Error Confidence	<p>(Confidenza errore di massa) Mostra il livello di confidenza nell'errore di massa.</p> <p>Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.</p>	Testo	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Mass Info	<p>(Info massa) Mostra le informazioni sulla massa associate al componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Per gli esperimenti MRM è Q1/Q3 e per gli esperimenti di profilo, o scansione completa, è Start - Stop. • Per gli esperimenti UV, ADC o DAD, è la lunghezza d'onda (DAD) o l'informazione di canale (UV/ADC). <p>Se esiste la massa di frammento, questa sarà usata per l'estrazione XIC.</p> <p>Se non esiste alcuna massa di frammento, per l'estrazione XIC si deve usare la massa precursore.</p>	Testo	Si
Modified	<p>(Modificato) Mostra se i parametri di rilevamento dei picchi sono stati modificati. La selezione della casella di controllo indica che i parametri di rilevamento dei picchi nel metodo di trattamento sono stati modificati, usando il pannello Peak Review.</p>	Numero	Si
MS Method	<p>(Metodo MS) Mostra il nome del metodo MS utilizzato per acquisire i dati.</p>	Testo	No
MW	<p>(Peso molecolare) Mostra il peso molecolare dell'analita, dal grafico ricostruito, in Da.</p> <p>Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.</p>	Numero	Si
MW Delta (Da)	<p>(Delta MW (Da)) Mostra la differenza tra il peso molecolare previsto e trovato, in Da.</p> <p>Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.</p>	Numero	Si
MW Delta (ppm)	<p>(Delta MW (ppm)) Mostra la differenza tra il peso molecolare previsto e trovato, in ppm.</p> <p>Applicabile solo ai flussi di lavoro di ricostruzione massa.</p>	Numero	Si

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Non-Targeted Peak	(Picco non mirato) Indica se il picco è stato rilevato dal rilevatore di picco migliorato. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	No
Operator Name	(Nome operatore) Mostra il nome dell'operatore dello strumento che ha acquisito il campione.	Testo	Sì
Original Filename	(Nome del file originale) Mostra il nome del file.	Testo	Sì

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Outlier Reasons	<p>(Motivi valori anomali) Quando la rimozione automatica dei valori anomali è stata abilitata nel metodo di quantificazione, mostra quale criterio è stato trovato fuori dei limiti predefiniti per il componente.</p> <p>La colonna Outlier Reasons è collegata alle regole per la rimozione automatica dei valori anomali nel metodo di quantificazione. Si tratta di una colonna predefinita della Results Table.</p> <p>Il motivo del valore anomalo è contrassegnato nel modo seguente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion ratio <p>Se è presente un picco solo per il quantificatore o qualificatore, il rapporto ionico viene contrassegnato per entrambi i componenti. Se nessuno di questi componenti ha picchi, il rapporto ionico non viene contrassegnato per nessuno dei due componenti.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Impossibile calcolare il rapporto ionico previsto • Una regola di segnalazione personalizzata creata dall'utente ha avuto esito negativo 	Testo	No
Peak Comment	(Comento picco) Mostra un commento arbitrario per la riga.	Testo	No
Plate Number	(Numero piastra) Mostra il numero di piastra dell'autocampionatore usato per acquisire i dati, come indicato nel Batch Editor.	Testo	Sì
Points Across Baseline	(Punti sulla linea di base) Mostra il numero di scansioni nel picco.	Numero	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Points Across Half Height	(Punti a metà altezza) Mostra il numero di scansioni attraverso il picco a circa il 50% dell'altezza.	Numero	No
Polarity	(Polarità) Mostra la polarità dell'esperimento utilizzato per acquisire il campione.	Testo	No
Precursor Mass	(Massa precursore) Mostra i parametri di elaborazione di ingresso presi dal metodo di trattamento. Questa colonna è sempre visibile nella Results Table. Nella finestra di dialogo Column Settings la casella di controllo non è disponibile.	Numero	No
Proc. Method Name	(Nome metodo di trattamento) Mostra il nome del metodo di trattamento che ha creato la Results Table.	Testo	Sì
Quality	(Qualità) Mostra la qualità del picco integrato. L'area del picco integrato e l'area di una finestra RT più grande vengono messe a confronto. Un valore 0 indica che il picco è scarsamente integrato o che non è presente alcun picco. Un valore 1,0 indica un picco ben integrato che non è necessario rivedere.	Numero	No
Rack Number	(Numero di rack) Mostra il numero di rack dell'autocampionatore usato per acquisire i dati, come specificato in Batch Editor.	Testo	Sì
Region Height	(Altezza area) Mostra l'altezza di picco del picco più grande vicino al picco rilevato. È utile insieme al campo Quality . I picchi di bassa qualità che hanno anche una ragionevole Region Height devono essere rivisti. Se Region Height è piccola, significa che non è presente alcun picco significativo.	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Relative RT	(RT relativo) Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, mostra il rapporto di Retention Time rispetto a IS Retention Time . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, questo valore è impostato su N/A .	Numero	Si
Reportable	(Riferibile) Mostra se il risultato è incluso nei report, nelle esportazioni e nei trasferimenti LIMS.	Numero	Si
Retention Time	(Tempo di ritenzione) Mostra l'effettivo tempo di ritenzione del picco rilevato, in minuti.	Numero	Si
Retention Time Delta (min)	(Delta tempo di ritenzione) Mostra la differenza tra il tempo di ritenzione definito per la massa e il tempo di ritenzione effettivo.	Numero	No
Retention Time Error (%)	(Errore tempo di ritenzione (%)) Mostra l'errore percentuale rilevato tra "Found at RT" e "Expected RT". Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Numero	No
RT Confidence	(Confidenza RT) Mostra la confidenza nel tempo di ritenzione. Applicabile esclusivamente a flussi di lavoro qualitativi.	Testo	No
Sample Comment	(Commento campione) Mostra un commento definito dall'utente per il campione.	Testo	Si

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Sample ID	<p>(ID campione) Mostra un identificatore definito dall'utente per il campione. Sample ID è specificato nel Batch Editor prima della presentazione del campione per l'acquisizione.</p> <p>Se il flusso di lavoro di aggiunta standard è abilitato nel metodo di trattamento, Sample ID viene usato come identificatore di gruppo per ciascun gruppo di aggiunta standard. SCIEX OS collega ciascun campione con una concentrazione di analita sconosciuta a campioni a cui sono state aggiunte concentrazioni note e variabili dello stesso analita.</p> <p>Sample ID può contenere fino a 252 caratteri. Sample ID non può contenere i seguenti caratteri: \ / : * ? " < > = o caratteri da 0 a 31 della tabella ASCII.</p>	Testo	Sì
Sample Index	<p>(Indice campione) Mostra l'indice del campione attuale.</p> <hr/> <p>Nota: Questa colonna è bloccata ed è sempre visualizzata sul lato sinistro della Results Table.</p> <hr/>	Numero	Sì
Sample Name	<p>(Nome campione) Mostra un nome definito dall'utente per il campione. Sample Name è specificato nel Batch Editor prima della presentazione del campione per l'acquisizione.</p> <p>Sample Name deve contenere da 1 a 252 caratteri. Sample Name non può contenere i seguenti caratteri: \ / : * ? " < > = o caratteri da 0 a 31 della tabella ASCII.</p> <hr/> <p>Nota: Questa colonna è bloccata ed è sempre visualizzata sul lato sinistro della Results Table.</p> <hr/>	Testo	Sì

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Sample Type	(Tipo campione) Mostra il tipo di campione.	Testo	Sì
Scanned Barcode	(Codice a barre scansionato) Mostra il codice a barre scansionato prima dell'iniezione.	Testo	Sì
Signal / Noise	(Segnale/Rumore) Mostra una stima del rapporto tra l'altezza del picco rilevato e il rumore di fondo presente nel cromatogramma. Per l'algoritmo di integrazione AutoPeak, il rumore di fondo è stimato mediante il rumore relativo calcolato e la linea di base nella posizione di apice del picco. L'algoritmo MQ4 utilizza un approccio simile salvo per il fatto che la linea di base è stimata utilizzando tutto il cromatogramma.	Numero	Sì
Slope of Baseline	(Pendenza linea di base) Mostra la pendenza del picco integrato dalla linea di base: <i>((intensità in corrispondenza dell'arresto del picco) - (intensità in corrispondenza del picco iniziale)) ÷ ampiezza di picco</i>	Numero	No
Start Time	(Tempo iniziale) Mostra il tempo di ritenzione iniziale del picco rilevato, in minuti.	Numero	Sì
Start Time at 10%	(Tempo iniziale al 10%) Mostra il tempo in minuti lungo il lato anteriore del picco dove l'intensità è al 10% dell'altezza del picco.	Numero	No
Start Time at 5%	(Tempo iniziale al 5%) Mostra il tempo in minuti lungo il lato anteriore del picco dove l'intensità è al 5% dell'altezza del picco.	Numero	No

Istruzioni operative - Elaborazione

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Std Addition Accuracy	<p>(Precisione aggiunta standard) Mostra la precisione dei campioni di concentrazioni note quantificate mediante l'aggiunta di standard di concentrazione variabile. Quando il flusso di lavoro di aggiunta è abilitato nel metodo di trattamento, il Sample Type per tutti i campioni viene automaticamente impostato su Standard. Se Sample Type viene modificato in un altro tipo, o se il flusso di lavoro di aggiunta standard non è abilitato, questo valore è impostato su N/A. Per i campioni di concentrazione nota, come il campione di controllo qualità in un lotto, Std Addition Accuracy è definito come:</p> $100\% \times (\text{Concentrazione calcolata di aggiunta standard}) / (\text{Concentrazione effettiva di aggiunta standard}).$	Numero	No
Std Addition Actual Concentration	<p>(Concentrazione effettiva aggiunta standard) Mostra la concentrazione nota prevista specificata dall'utente per i campioni quantificati mediante aggiunta standard. Ad esempio, un campione di controllo qualità in un lotto. Se Sample Type non è Standard, questo valore è impostato su N/A.</p>	Numero	No

Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Std Addition Calculated Concentration	<p>(Concentrazione calcolata aggiunta standard) Mostra il valore della concentrazione ricalcolata estrapolando la curva di aggiunta standard all'intercetta X utilizzando la regressione lineare e senza ponderazione. Per i campioni quantificati mediante aggiunta standard, Std Addition Calculated Concentration è definita come:</p> <p>Intercetta/Pendenza</p> <p>Se Sample Type non è Standard, se il flusso di lavoro di aggiunta standard non è abilitato nel metodo di trattamento o se non viene rilevato alcun picco nei campioni non addetti di un gruppo di aggiunta standard, questo valore viene impostato su N/A.</p>	Numero	No
Tailing Factor	<p>(Fattore di scodamento) Mostra la distanza dalla pendenza anteriore del picco alla pendenza posteriore divisa per la distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza anteriore. Tutte le misurazioni vengono eseguite al 5% dell'altezza del picco massima.</p>	Numero	No
Time Since First Sample (min)	<p>(Tempo dal primo campione (minuti)) Mostra la quantità di tempo, in minuti, dall'avvio dell'acquisizione del primo campione.</p>	Numero	No
Time Since Last Sample (sec)	<p>(Tempo dall'ultimo campione (minuti)) Mostra la quantità di tempo, in secondi, dall'avvio dell'acquisizione dell'ultimo campione.</p>	Numero	No
Total Width	<p>(Larghezza totale) Mostra la larghezza del picco cromatografico, in minuti, alla linea di base.</p>	Numero	Si

Istruzioni operative - Elaborazione

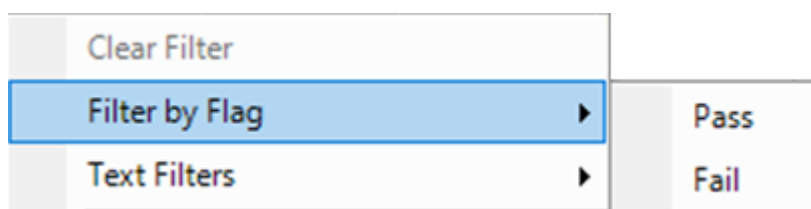
Etichetta	Descrizione	Formato	Supportata da LIS
Used	(Utilizzato) Mostra se il risultato è utilizzato. <ul style="list-style-type: none">• Per i tutti i campioni, una casella di controllo selezionata indica che il risultato è utilizzato per il calcolo dei valori di riferimento e l'esecuzione delle regole per la segnalazione.• Per i campioni standard, una casella di controllo selezionata indica che il risultato è utilizzato per la costruzione della curva di calibrazione, la regressione e i calcoli statistici.• Per i campioni QC, la casella di controllo selezionata indica che il risultato è utilizzato per il calcolo delle statistiche di controllo qualità.• Per altri tipi di campione, una casella di controllo selezionata indica che il risultato è utilizzato per i calcoli.	Numero	Si
Vial Number	(Numero fiala) Mostra il numero di fiala dell'autocampionatore usato per acquisire i dati, come specificato nel lotto.	Testo	Si
Width at 10%	(Larghezza al 10%) Mostra la larghezza del picco misurata al 10% dell'altezza del picco.	Numero	No
Width at 5%	(Larghezza al 5%) Mostra la larghezza del picco misurata al 5% dell'altezza del picco.	Numero	No
Width at 50%	(Larghezza al 50%) Mostra la larghezza del picco cromatografico, in minuti, del picco rilevato misurato a metà dell'intensità apice.	Numero	Si
XIC Width (Da)	(Ampiezza XIC (Da)) Mostra l'ampiezza del cromatogramma ionico estratto, in Dalton.	Numero	Si
XIC Width (ppm)	(Ampiezza XIC (ppm)) Mostra l'ampiezza del cromatogramma ionico estratto, in ppm (parti per milione).	Numero	Si

Filtri di accettazione

Utilizzare l'opzione **Filter by Flag** nel menu Filter per una colonna della Results Table per scegliere se filtrare la colonna in base ai criteri di accettazione. La Results Table può essere filtrata su criteri di accettazione, come indicato di seguito:

- **Pass:** mostra le righe che corrispondono ai criteri definiti nel metodo di trattamento.
- **Fail:** mostra le righe che non corrispondono ai criteri definiti nel metodo di trattamento.

Figura 6-26: Filter By Flag



I filtri di accettazione possono essere selezionati per qualsiasi colonna alla quale è stata applicata una regola di segnalazione, nonché ai seguenti criteri di accettazione:

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

Semafori di confidenza

Utilizzare i criteri di accettazione per definire le righe di qualificazione. Una riga di qualificazione è una riga in cui i criteri di accettazione corrispondono ai criteri definiti nel metodo di trattamento.

Figura 6-27: Righe di qualificazione

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"/>
¹⁴ 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 _n H _n Formula	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

I semafori mostrano lo stato di confidenza di ciascuna riga alla quale è applicata una regola qualitativa o una regola per l'accettazione del rapporto ioni. Per informazioni sulle regole di segnalazione, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Suggerimento! La Results Table può essere filtrata utilizzando i filtri del semaforo di confidenza. Selezionare la casella di controllo **Qualify for Rules Filters** per attivare la visualizzazione della Results Table tra le righe che corrispondono ai filtri di confidenza e quelli che non corrispondono. I filtri di confidenza includono: Pass, Marginal, Fail e N/A.

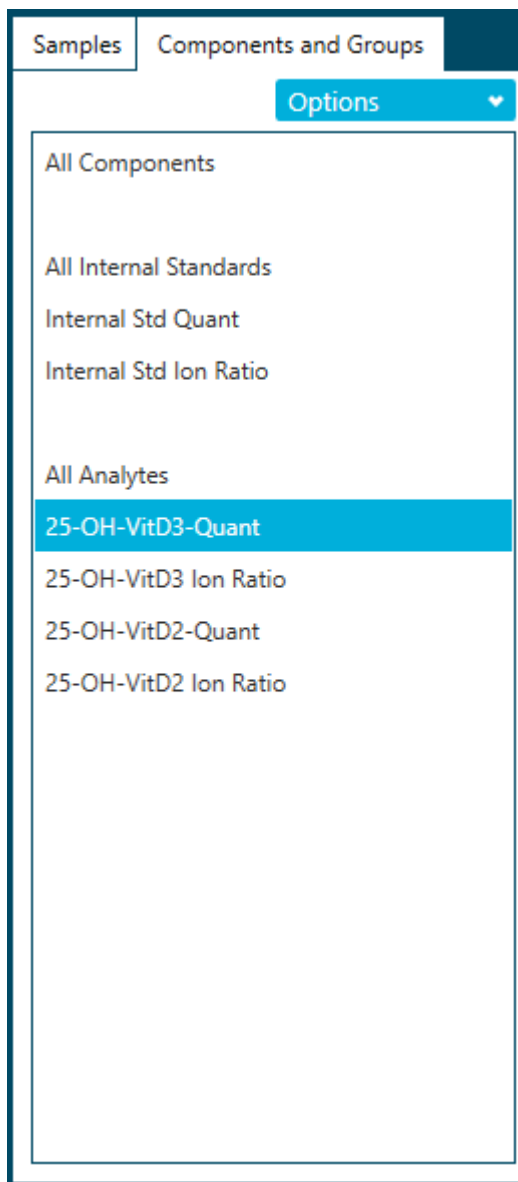
Tabella 6-6: Semafori di confidenza

Icona del semaforo	Descrizione
	Mostra quali componenti soddisfano i criteri di confidenza definiti nel modello di elaborazione.
	Mostra quali componenti soddisfano il livello di differenza percentuale marginale definito nel modello di elaborazione.
	Mostra quali componenti soddisfano il livello di differenza percentuale inaccettabile definito nel modello di elaborazione.
	Mostra quali parametri di confidenza non sono applicabili al componente.

Elenco dei componenti e dei gruppi

Quando una Results Table è aperta, a sinistra della finestra principale viene visualizzato un elenco dei componenti e gruppi attuali. Utilizzare l'elenco per modificare i componenti da visualizzare nei risultati, nonché in qualsiasi riquadro Peak Review o Calibration Curve collegato. Tutte le informazioni vengono mostrate come definito nel metodo di trattamento.

Figura 6-28: Components and Groups



Fare clic su una voce dell'elenco per visualizzare i componenti che appartengono soltanto a essa. Utilizzare **Shift+clic** o **Ctrl+clic** per selezionare più elementi, ad esempio due analiti specifici.

Suggerimento! Modificare l'ampiezza dell'elenco trascinando il bordo destro del riquadro verso sinistra o verso destra.

L'ordine delle righe nella Results Table non viene interessato dai filtri. La tabella è predefinita per essere ordinata dapprima per campione, quindi per componente, nell'ordine indicato nel metodo di trattamento.

Tabella 6-7: Options


Etichetta	Descrizione
Show IS	(Mostra IS) Fare clic per mostrare le righe della Results Table per l'analita attualmente selezionato e il relativo standard interno. Equivale a fare clic sull'analita e a selezionare successivamente lo standard interno premendo Ctrl , in modo che entrambi siano selezionati.
Find	(Trova) Fare clic per selezionare le voci dell'elenco che corrispondono al testo specificato.

Verifica dei picchi

Procedure preliminari

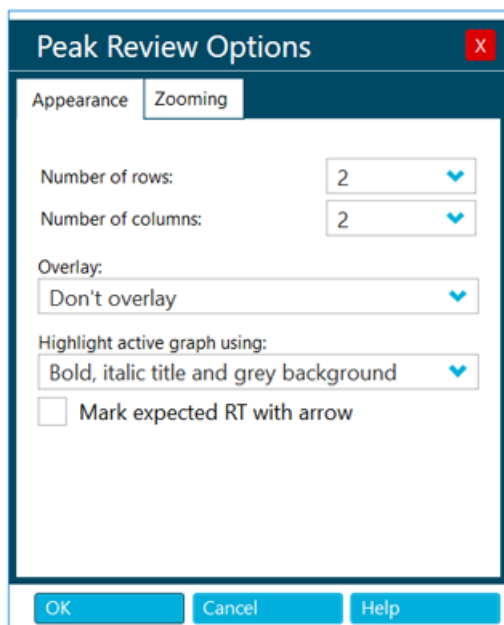
- Aprire una Results Table.

Usare il riquadro Peak Review per:

- Ispezionare visivamente i cromatogrammi grezzi in modo da determinare la qualità del processo di ricerca dei picchi.
 - Correggere i cromatogrammi che non si sono integrati correttamente, regolando i parametri di ricerca dei picchi oppure selezionando manualmente i punti di integrazione iniziale e finale. Una volta reintegrato il cromatogramma, la Results Table viene aggiornata automaticamente con la nuova area dei picchi e altri parametri.
 - Ispezionare visivamente gli spettri di MS e MS/MS per lo XIC integrato.
 - Rivedere i risultati di Formula Finding e della Library Search e, se necessario, aggiornare manualmente i risultati nella Results Table.
 - (Flusso di lavoro di ricostruzione massa) Ispezionare visivamente lo spettro medio e lo spettro di ricostruzione.
 - (Flusso di lavoro di ricostruzione massa) Correggere i cromatogrammi in cui l'area XIC non è stata selezionata correttamente, regolando i parametri di rilevamento picchi o selezionando manualmente l'area XIC. Dopo che viene selezionata una nuova area XIC, vengono generati nuovamente lo spettro medio e lo spettro di ricostruzione.
 - (Flusso di lavoro di ricostruzione massa) Correggere i picchi di massa non selezionati correttamente regolando i parametri Mass Peak Selection o selezionando manualmente il picco di massa. Dopo che viene modificato il picco di massa, la Results Table viene aggiornata automaticamente con il nuovo picco e altri parametri.
1. Fare clic su **Displays the peak review** ()
 2. Nell'elenco **Components and Group** nel riquadro a sinistra, selezionare un componente.
 3. (Opzionale) Personalizzare il layout del riquadro Peak Review con il menu **View** menu. Per una descrizione delle opzioni **View**, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

- (Opzionale) Fare clic su **Options > Peak review display settings** per modificare l'aspetto del riquadro Peak Review. Ad esempio, selezionare il numero di cromatogrammi da visualizzare contemporaneamente. Per le descrizioni delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Figura 6-29: Finestra di dialogo Peak Review Options



- (Opzionale) per ingrandire un picco, utilizzare uno dei seguenti metodi:
 - Fare clic su **Options > Peak review display settings**, quindi su **Zooming** per modificare i parametri di ingrandimento dei picchi.
 - Trascinare il cursore sulla regione da ingrandire sull'asse X o Y.
- (Opzionale) Per espandere un picco per riempire completamente il riquadro Peak Review, selezionare il picco e fare clic su **Peak magnifier** (🔍).

Suggerimento! Quando un'icona nel riquadro Peak Review è nera, la funzione corrispondente è attivata. Per disattivarla, fare clic di nuovo sull'icona.

- (Opzionale) Per visualizzare e regolare l'area del rumore nel grafico, fare clic su **Options > Show Noise Regions** e regolare l'area del rumore, se applicabile. Fare riferimento alla sezione: [Lavorare con l'area del rumore](#).


Nota: Le aree del rumore possono essere regolate solo se viene utilizzato l'algoritmo segnale-rumore **Peak to Peak** o **Standard Deviation**.

- Se un cromatogramma o un grafico di ricostruzione contiene più picchi e viene integrato un picco errato, trascinare il picco corretto per impostare un nuovo tempo di ritenzione previsto o peso molecolare previsto. Se necessario, regolare il rilevamento del picco e i parametri di integrazione.


Istruzioni operative - Elaborazione


9. (Opzionale) Per applicare i nuovi parametri a tutti i campioni del componente o gruppo campioni, utilizzare le opzioni del menu contestuale. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla sezione: [Lavorare con i picchi nel riquadro Peak Review](#).

Suggerimento! Per visualizzare i picchi integrati, fare clic su **Displays the peak**


review (). Nel riquadro Peak Review, selezionare **Options > Show navigation controls**. Quindi fare clic sulle icone di navigazione. Per una descrizione delle icone, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.


Suggerimento! Cancellare l'integrazione facendo clic su **Set peak to "not found"**

(). L'utente può vedere i dati grezzi prima di integrare manualmente il picco. Non è possibile modificare i parametri di integrazione.

10. Fare clic su **Enable manual integration mode** () nel riquadro Peak Review per utilizzare la modalità Manual Integration.
11. Trascinare il cursore dalla base di un lato del picco interessato all'altro. Il picco viene integrato manualmente e i parametri di integrazione precedentemente utilizzati diventano indisponibili.

Suggerimento! Se il picco è appena stato modificato, è possibile riportarlo al metodo originale facendo clic con il pulsante destro del mouse e selezionando **Revert Peak to Original Method**.

Suggerimento! Per annullare l'integrazione manuale e abilitare i campi dei parametri di integrazione, deselezionare la casella di controllo **Manual Integration** e fare clic di nuovo su **Enable manual integration mode** ().

12. (Opzionale) Per visualizzare il picco attuale nell'area di lavoro Explorer, fare clic su **Open data exploration** ().

L'attuale livello di ingrandimento è conservato.

Nota: L'integrazione manuale di un picco persiste finché l'utente non modifica l'integrazione per tale picco nel riquadro Peak Review o modifica il metodo incorporato per modificare il componente.

Nota: Nel flusso di lavoro di ricostruzione massa, se un picco di ricostruzione massa viene integrato manualmente, l'area XIC corrispondente e lo spettro medio persistono finché l'utente non modifica l'integrazione per tale picco nel riquadro Peak Review o modifica il metodo incorporato per modificare il componente.

Lavorare con i picchi nel riquadro Peak Review

Tabella 6-8: Funzionalità Peak Review

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Copiare i parametri di integrazione	<p>Usare questo comando insieme a Paste Integration Parameters per copiare i parametri di rilevamento dei picchi da un cromatogramma all'altro. Questo comando può essere utilizzato se la stessa regolazione dei parametri deve essere eseguita per diversi cromatogrammi.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su Copy Integration Parameters. 2. Per applicare la modifica a tutti i cromatogrammi del componente, usare il comando Update Processing Method for Component. 3. Per applicare la modifica a tutti i cromatogrammi del gruppo, usare il comando Update Processing Method for Group.
Incollare i parametri di integrazione	<p>Usare questo comando insieme a Copy Integration Parameters per copiare i parametri di rilevamento dei picchi da un cromatogramma all'altro.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su Copy Integration Parameters. 2. Fare clic con il pulsante destro del mouse su un cromatogramma diverso e fare clic su Paste Integration Parameters.
Aggiornare il metodo di trattamento per un componente	<p>Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, usare questo comando per modificare la copia del metodo di trattamento salvato con la Results Table per utilizzare tali parametri per il componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Regolare i parametri di rilevamento dei picchi, fare clic con il pulsante destro e selezionare Update Processing Method for Component. <p>Per il componente specifico, tutti i campioni vengono automaticamente integrati per utilizzare i nuovi parametri e il riquadro Peak Review e la Results Table vengono aggiornati. Se alcuni picchi sono stati integrati manualmente, all'utente viene chiesto se la reintegrazione deve applicarsi a tutti i picchi o solo a quelli che non sono stati integrati manualmente.</p>

Tabella 6-8: Funzionalità Peak Review (continua)

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
<p>Aggiornare il metodo di trattamento per un gruppo</p>	<p>(Non applicabile al flusso di lavoro di ricostruzione massa) Come per l'opzione Update Processing Method for Component, salvo che l'integrazione si applica a tutti i componenti che appartengono allo stesso gruppo del componente del cromatogramma attualmente attivo. Se l'utente ha assegnato i vari componenti a gruppi e se si prevede che i componenti assegnati a un dato gruppo abbiano lo stesso tempo di ritenzione, questo comando è utile in quanto consente di ripristinare i parametri, compreso il tempo di ritenzione previsto, per tutti i componenti del gruppo in una volta sola. Questo comando non è utile se i componenti dei gruppi non hanno gli stessi tempi di ritenzione.</p> <ul style="list-style-type: none"> Regolare i parametri di rilevamento dei picchi, fare clic con il pulsante destro e selezionare Update Processing Method for Group.
<p>Aggiornare il metodo di trattamento per un gruppo, tranne Expected MW</p>	<p>(Solo flussi di lavoro di ricostruzione massa) Come per l'opzione Update Processing Method for Component, salvo che l'integrazione si applica a tutti i componenti che appartengono allo stesso gruppo del componente del cromatogramma e del grafico di ricostruzione attualmente attivi. Se l'utente ha assegnato i vari componenti a gruppi e se si prevede che i componenti assegnati a un dato gruppo abbiano lo stesso tempo di ritenzione e gli stessi parametri di integrazione, questo comando è utile in quanto consente di ripristinare i parametri, compreso il tempo di ritenzione previsto, per tutti i componenti del gruppo in una volta sola. Questo comando non è utile se i componenti dei gruppi non hanno gli stessi tempi di ritenzione. Questo comando non si applica a Expected MW.</p> <ul style="list-style-type: none"> Regolare i parametri di rilevamento dei picchi e di integrazione, fare clic con il pulsante destro e selezionare Update Processing Method for Group, Excluding Expected MW.

Tabella 6-8: Funzionalità Peak Review (continua)

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Applicare i parametri di integrazione al campione di un gruppo	<p>(Non applicabile al flusso di lavoro di ricostruzione massa) Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, usare questo comando per applicare i parametri a tutti i composti in un campione che appartiene allo stesso gruppo del composto modificato.</p> <ul style="list-style-type: none"> Regolare i parametri di rilevamento dei picchi per il cromatogramma, fare clic con il pulsante destro e selezionare Apply integration parameters to sample within a group.
Applicare i parametri di integrazione al campione di un gruppo, tranne Expected MW	<p>(Solo flussi di lavoro di ricostruzione massa) Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico e i parametri di integrazione per un grafico di ricostruzione, usare questo comando per applicare i parametri a tutti i composti in un campione che appartiene allo stesso gruppo del composto modificato. Questo comando non si applica a Expected MW.</p> <ul style="list-style-type: none"> Regolare i parametri di rilevamento dei picchi per il cromatogramma e i parametri di integrazione per il picco di massa deconvoluto, fare clic con il pulsante destro del mouse e selezionare Apply integration parameters to sample within a group, excluding Expected MW.
Ripristinare un picco al metodo originale	<p>Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, utilizzare questo comando per applicare i parametri originali dalla copia del metodo di trattamento salvata con la Results Table nel cromatogramma.</p> <ul style="list-style-type: none"> In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi selezionare Revert Peak to Original Method.

Tabella 6-8: Funzionalità Peak Review (continua)

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Ripristinare tutti i picchi di un componente	<p>Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per alcuni cromatogrammi, usare questo comando per applicare i parametri originali dalla copia del metodo di trattamento salvata con la Results Table in tutti i cromatogrammi per lo stesso componente del cromatogramma attivo. Se alcuni picchi sono stati integrati manualmente, all'utente viene chiesto se la reintegrazione deve applicarsi a tutti i picchi o solo a quelli che non sono stati integrati manualmente.</p> <ul style="list-style-type: none">• In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi selezionare Revert All Peaks for Component.

Lavorare con l'area del rumore

Se si utilizza l'algoritmo segnale-rumore **Peak to Peak** o **Standard Deviation**, le aree del rumore possono essere regolate in modo interattivo nella pagina Integration del metodo di trattamento e nel riquadro Peak Review.

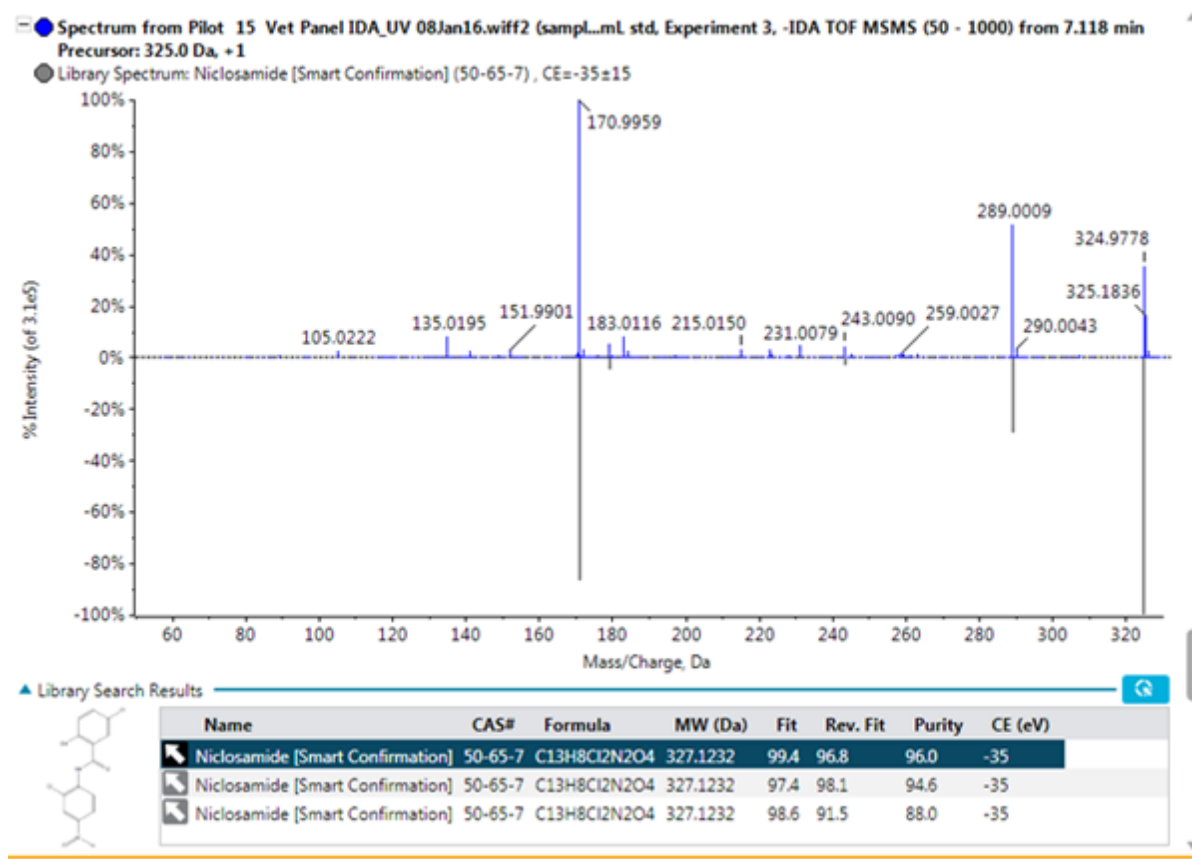
1. Fare clic sull'area del rumore nel grafico e spostarla nella posizione richiesta.
2. Spostare il cursore sul bordo destro o sinistro dell'area del rumore finché non viene visualizzata una freccia a due punte. Quindi trascinare il bordo nella posizione richiesta per regolare la dimensione dell'area del rumore.



Analisi dei picchi utilizzando i risultati della ricerca della formula o i risultati della ricerca nella libreria

Suggerimento! Fare clic su **Options > Peak review display settings** per modificare il numero di righe visualizzate nel riquadro. Gli utenti possono inoltre trascinare verso l'alto la parte superiore del riquadro per aumentare le dimensioni del riquadro Peak Review.

1. Nel riquadro Peak Review, fare clic su **View**, quindi su **XIC + MS**, **XIC + MS/MS** o **XIC + MS + MS/MS**.
I risultati della ricerca vengono visualizzati sotto i grafici.

Figura 6-30: Library Search Results

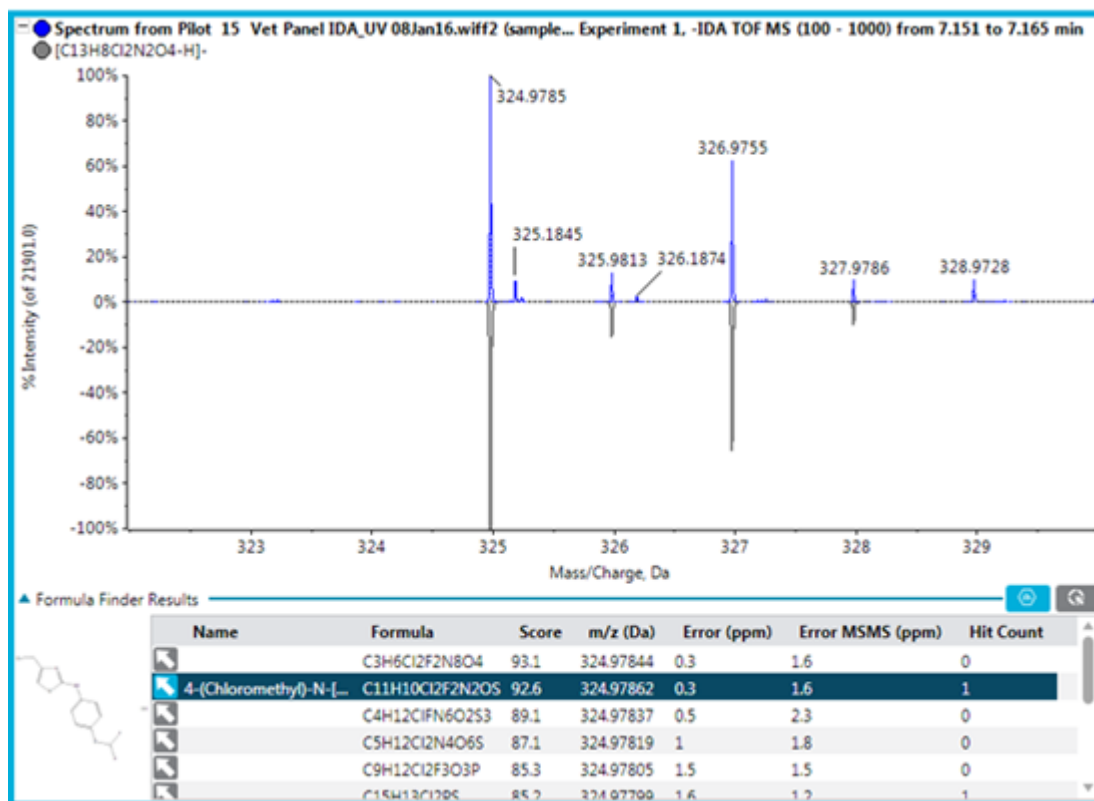


2. Fare clic sulla freccia blu per espandere **Library Search Results** e mostrare ulteriori possibili corrispondenze nella libreria.
Nella tabella viene mostrata anche la struttura chimica della corrispondenza nella libreria selezionata.
3. Fare di nuovo clic sulla freccia per comprimere la tabella.
I risultati mostrati nella tabella compressa sono mostrati anche nella Results Table.
4. (Opzionale) Selezionare una riga nella tabella, quindi fare clic su  per aggiornare i risultati nella Results Table e utilizzare quella specifica corrispondenza nella libreria per l'analisi.
5. (Opzionale) Fare clic su  per aggiornare il metodo di trattamento con le informazioni per il composto selezionato.
6. Per aggiungere uno spettro al database della libreria, attenersi alla seguente procedura:
 - a. Fare clic col pulsante destro sullo spettro, quindi fare clic su **Add spectrum to library**.
Viene aperta la finestra di dialogo Add spectrum to library.
 - b. Aggiornare i campi **Compound Name**, **Library** e **Precursor m/z**.
 - c. Fare clic su **OK**.



Istruzioni operative - Elaborazione

7. Fare clic sulla freccia blu per espandere **Formula Finder Results** e mostrare ulteriori risultati possibili.


Figura 6-31: Formula Finder Results



Nella tabella viene mostrata anche la formula chimica dei risultati della ricerca della formula selezionati se il composto è stato aggiornato da ChemSpider.

8. Fare di nuovo clic sulla freccia per comprimere la tabella. I risultati mostrati nella tabella compressa sono mostrati anche nella Results Table.
9. Fare clic su  per aggiornare la colonna **Formula Finder Results** nella Results Table con il composto selezionato.
10. Fare clic su  per aggiornare il metodo di trattamento con le informazioni del composto selezionato.

Suggerimento! Fare clic su **Options > Get Chemspider hit count** per mostrare la colonna **ChemSpider Hit Count** nella tabella sotto il grafico.

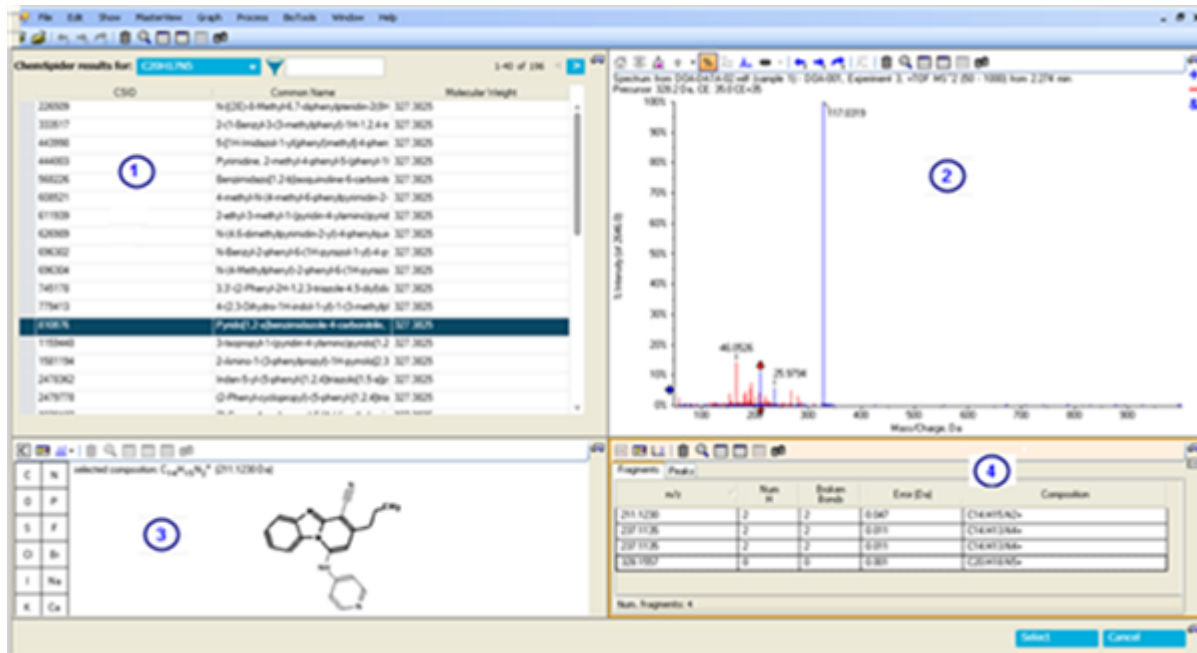
11. Fare clic su  per aprire l'applicazione ChemSpider.
Fare riferimento alla sezione: [ChemSpider](#).

ChemSpider

Nota: La workstation deve avere un file di licenza valido per accedere al database ChemSpider.

Nota: le informazioni nell'immagine seguente vengono fornite a solo titolo di esempio.

Figura 6-32: Sessione ChemSpider



Elemento	Descrizione
1	Riquadro dei risultati: mostra un elenco dei composti suggeriti che soddisfano la formula selezionata. I risultati vengono raggruppati in gruppi di 40 composti. Utilizzare la freccia destra per passare al gruppo successivo nell'elenco. Utilizzare la freccia sinistra per tornare al gruppo precedente nell'elenco.
2	Riquadro Spectra: mostra gli spettri acquisiti (in rosso) e i frammenti corrispondenti (in blu). Un maggior numero di frammenti blu indica una migliore corrispondenza.
3	Riquadro Structure: mostra la struttura chimica del composto selezionato nel riquadro dei risultati.
4	Riquadro Fragment table, scheda Fragments: mostra il numero totale di frammenti corrispondenti per il composto selezionato.
4	Riquadro Fragment table, scheda Peaks: mostra il numero totale di picchi, il numero di picchi corrispondenti e la % dell'intensità totale per il composto selezionato. La casella di controllo nella colonna Assigned viene selezionata automaticamente per i picchi corrispondenti.

Tabella 6-9: Funzioni ChemSpider

Obiettivo	Azione
Digitare informazioni nel campo accanto all'icona Filter XIC List .	Il riquadro dei risultati viene aggiornato e contiene solo i risultati che soddisfano i criteri immessi.
Fare clic sulle voci nel riquadro dei risultati.	I riquadri rimanenti vengono aggiornati e mostrano le informazioni associate alla selezione.
Fare clic sulle voci nella scheda Fragments del riquadro della tabella dei frammenti.	I riquadri rimanenti vengono aggiornati. Nel riquadro degli spettri, le frecce rosse compaiono nella parte superiore e nella parte inferiore del frammento corrispondente (in blu). Nel riquadro struttura, i componenti della struttura chimica che corrispondono al frammento vengono evidenziati (grassetto).
Fare clic sulle voci Assigned nella scheda Peaks del riquadro della tabella dei frammenti.	I riquadri rimanenti vengono aggiornati. Nel riquadro degli spettri, le frecce rosse compaiono nella parte superiore e nella parte inferiore del frammento corrispondente (in blu). Nel riquadro struttura, i componenti della struttura chimica che corrispondono al frammento vengono evidenziati (grassetto).
Fare clic sulla freccia giù a destra del campo ChemSpider results for e selezionare l'opzione ChemSpider web site	Il sito Web di ChemSpider (www.chemspider.com) viene aperto nella finestra del browser. Consultare l'Help di ChemSpider per conoscere come accedere alle informazioni.
Fare clic sulla freccia giù a destra del campo ChemSpider results for e selezionare l'opzione Refresh	Tutte le modifiche vengono ignorate e la sessione ritorna ai risultati di ricerca originali.
Fare clic su Select	Le informazioni selezionate nella sessione ChemSpider vengono copiate nel riquadro Formula Finder Results nella sessione del software. La sessione ChemSpider viene chiusa.

Suggerimenti per il riquadro Peak Review

- Ordinare la Results Table su una colonna particolare e rivedere solo quei cromatogrammi che si ordinano nella parte superiore o inferiore della tabella.
- Il riquadro Peak Review è sempre sincronizzato con la Results Table corrispondente e mostra i cromatogrammi per gli stessi picchi, nello stesso ordine, come nella Results Table. Qualsiasi modifica, come ordinare le righe, filtrare tipi di campioni o selezionare componenti, apportata alla Results Table si riflette automaticamente nel riquadro Peak Review.
- Utilizzare la barra di scorrimento a destra del riquadro per scorrere i cromatogrammi disponibili. Quando è attivo il riquadro Peak Review, utilizzare i tasti freccia verso l'alto

o verso il basso sulla tastiera oppure la rotellina del mouse per spostarsi all'interno del cromatogramma.

- Selezionare una riga nella Results Table facendo clic nella regione azzurra a sinistra della prima colonna per visualizzare il picco corrispondente nel riquadro Peak Review. Se l'utente scorre a un particolare cromatogramma nel riquadro Peak Review, la Results Table evidenzia la riga corrispondente, quindi la visualizza.
- Il raggruppamento dei numeri non è supportato nell'area di lavoro Analytics. Gli utenti non devono raggruppare i numeri in alcuna casella di testo, ad esempio, parametri di integrazione, e griglia (ad esempio, Results Table).
- In un qualsiasi momento, un cromatogramma è considerato attivo ed è indicato dal titolo in grassetto. Rendere attivo un cromatogramma particolare facendo clic in un qualsiasi punto al suo interno.

ATTENZIONE: Rischio di perdita di dati. Fare attenzione a non trascinare il cursore dentro un cromatogramma perché così facendo si regola il tempo di ritenzione previsto e si provoca il cambiamento dell'integrazione.

- Se l'utente trascina attraverso un picco particolare in un cromatogramma, il parametro di integrazione **Expected RT** viene aggiornato con l'effettivo tempo di ritenzione del picco. Il nuovo tempo di ritenzione viene quindi applicato automaticamente e il software integra nuovamente il picco, aggiornando la Results Table di conseguenza.
- (Flusso di lavoro ricostruzione massa) Se l'utente trascina attraverso un picco particolare in un grafico di ricostruzione, il parametro di integrazione **Expected MW** viene aggiornato con l'effettivo peso molecolare del picco. Il nuovo peso molecolare è quindi automaticamente applicato e il software integra nuovamente il picco, aggiornando la Results Table di conseguenza.
- (Mass Reconstruction workflow) Se non è selezionato **Recentered on the largest XIC Peak**, l'utente può selezionare manualmente l'area XIC desiderata. Il tempo al centro dell'area XIC diventa l'RT previsto e l'RT del picco più grande nell'area XIC diventa l'RT trovato.
- Se l'utente sta verificando i picchi in modalità di integrazione manuale, trascinando il cursore attraverso i picchi si integra manualmente il picco selezionato. Tenendo premuto **Shift** durante il trascinamento è più facile mantenere la linea dritta.
- Quando un cromatogramma diventa attivo, i parametri di integrazione mostrati a sinistra del riquadro vengono aggiornati per riflettere il nuovo cromatogramma attivo. Se l'utente regola i parametri di integrazione del picco, quindi fa clic su **Apply**, viene interessato il cromatogramma correntemente attivo.
- Gli utenti devono controllare la forma dei picchi durante la peak review per individuare potenziali picchi saturati e per assicurarsi che l'integrazione parziale o errata non porti erroneamente a concentrazioni riportate in modo non corretto.
- Gli utenti devono verificare nei cromatogrammi durante la verifica dei picchi l'eventuale presenza di picchi di rumore eccessivo che possono indicare problemi al sistema.
- Fare doppio clic all'interno dell'asse Y per scalare l'asse sul picco più intenso all'interno dell'intero set di dati. Per ingrandire, muoversi all'interno dell'asse per selezionare un intervallo di intensità.

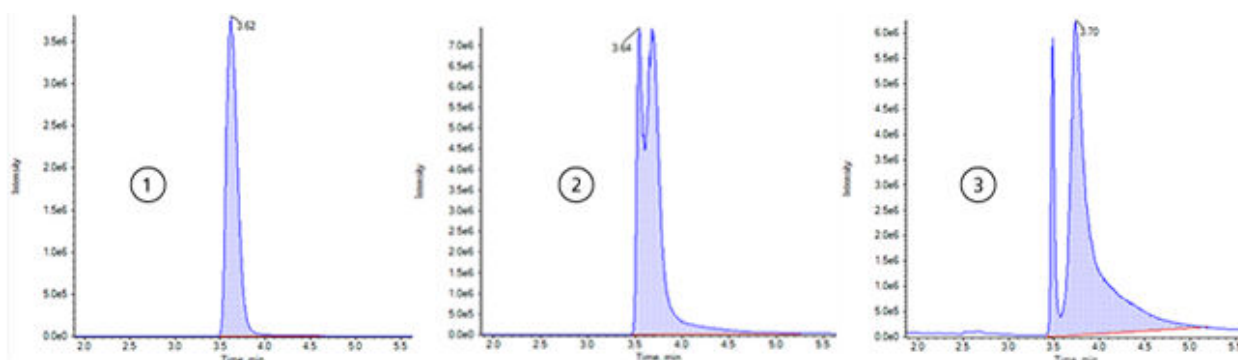
Istruzioni operative - Elaborazione

- Fare doppio clic nell'asse X per riportare il grafico alla visualizzazione iniziale in cui tutti i dati sono visibili. Per ingrandire, muoversi all'interno dell'asse per selezionare un intervallo di tempo.
- Quando si procede campione per campione nella Results Table, fare clic su **Results > Cache all chromatograms for faster peak review** per migliorare le prestazioni.

I campioni di concentrazioni estremamente alte, molto al di sopra del limite superiore di quantificazione, o ULOQ, potrebbero portare a picchi saturati sempre più ampi con forme distorte o divise.

La figura seguente mostra la concentrazione massima che può essere quantificata utilizzando la regressione lineare.

Figura 6-33: Esempi di picchi non saturati e saturati



Elemento	Descrizione
1	Mostra un picco accettabile che può essere utilizzato per la quantificazione.
2	Mostra un picco saturato. La concentrazione del campione che ha generato questo picco è molto al di sopra del ULOQ. Quando il picco si satura, diventa più ampio e la sua sommità è invertita a causa della soppressione del guadagno. Esso deve essere escluso dalla quantificazione perché l'integrazione parziale potrebbe determinare concentrazioni riportate in modo non corretto.
3	Mostra la saturazione estrema che provoca il picco LC che si separa in due picchi. Esso deve essere escluso dalla quantificazione perché l'integrazione parziale potrebbe determinare concentrazioni riportate in modo non corretto.

Analisi dei dati utilizzando le statistiche

Procedure preliminari

- Aprire una Results Table.

Usare il riquadro Statistics per visualizzare le informazioni relative alla riproducibilità di un'analisi. Ogni riga nella tabella riepiloga informazioni, quali la deviazione media e la deviazione standard di un gruppo di picchi correlati dello stesso analita, che dovrebbero avere la stessa risposta.

Rivedere l'integrazione dei picchi, la curva di calibrazione e le statistiche dei campioni mediante un processo iterativo. La precisione impostata per il campo **Actual Concentration** nella Results Table viene utilizzata anche nella tabella delle statistiche.

Nota: per informazioni sui valori accettati per le statistiche, compresi il coefficiente di variazione percentuale e l'accuratezza, fare riferimento alle procedure operative standard di laboratorio.

Aprire la Results Table, quindi fare clic su **Views > Statistics pane**.

Colonne del riquadro Statistics

Etichetta	Descrizione
Row	(Riga) Mostra il numero di riga.
Component Name	(Nome componente) Mostra il nome dell'analita.
Sample Name/ Actual Concentration	(Nome campione/Concentrazione effettiva) Quando i campioni vengono raggruppati per concentrazione effettiva, mostra la concentrazione. Quando i campioni vengono raggruppati per nome del campione, mostra il nome del campione.
Num. Values	(Valori num.) Mostra m di n , dove n rappresenta il numero totale di campioni alla concentrazione effettiva, o con lo stesso nome del campione, ed m rappresenta il numero dei campioni utilizzati per i calcoli. I campioni non vengono utilizzati se non è stato possibile integrarne il picco oppure se il campo Used è stato cancellato manualmente.
Mean	(Media) Mostra la media dei campioni utilizzati.
Standard Deviation	(Deviazione standard) Mostra la deviazione standard dei campioni utilizzati.
Percent CV	(CV percentuale) Mostra il coefficiente di varianza espresso come percentuale: $100 * \text{Standard Deviation} / \text{Mean}$.
Accuracy	(Accuratezza) Mostra il valore medio diviso per la concentrazione effettiva espressa come percentuale: $100 * \text{Mean} / \text{Actual Concentration}$. Questo campo viene visualizzato solo in caso di raggruppamento in base alla concentrazione effettiva, non in caso di raggruppamento in base al nome del campione.
Values	(Valori) Mostra i singoli valori per i campioni in colonne aggiuntive. Se non è stato possibile integrare il campione corrispondente, viene visualizzato il valore N/A . Se il campo Used è stato cancellato manualmente, il valore viene visualizzato con una linea barrata.

Etichetta	Descrizione
Group by	<p>(Raggruppa per) Specifica come il campione per un dato analita deve essere raggruppato per il calcolo delle statistiche. Sono disponibili le opzioni seguenti:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards (Raggruppa per concentrazione per standard): i campioni standard vengono raggruppati in base alla concentrazione effettiva. • Group by Concentration for QCs (Raggruppa per concentrazione per QC): i campioni di controllo qualità vengono raggruppati in base alla concentrazione effettiva. • Group by Sample Name for Standards (Raggruppa per nome campione per standard): i campioni standard replicati vengono raggruppati in base al campo Sample Name. • Group by Sample Name for QCs (Raggruppa per nome campione per QCs): i campioni replicati di controllo qualità vengono raggruppati in base al campo Sample Name. • Group by Sample Name for All Samples (Raggruppa per tutti i campioni): tutti i campioni replicati vengono raggruppati in base al campo Sample Name.
Metrica	<p>Specifica la metrica effettiva utilizzata per il calcolo delle statistiche. Sono disponibili le opzioni seguenti:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration (Concentrazione calcolata): viene utilizzato il campo Calculated Concentration della Results Table. • Area (Area): viene utilizzato il campo Area della Results Table. • Height (Altezza): viene utilizzato il campo Height della Results Table. • Calibration Y-Value (Valore Y calibrazione): viene utilizzato il parametro di regressione specificato per l'analita. È Area o Height per un analita senza uno standard interno corrispondente oppure Area Ratio o Height Ratio per un analita che utilizza uno standard interno.
Save Results and Export	<p>(Salva risultati ed esporta) Fare clic per salvare i risultati ed esportare la tabella delle statistiche. Viene visualizzata la finestra di dialogo Export Statistics.</p>

Suggerimenti del riquadro Statistics


- Nell'elenco **Components and Groups**, selezionare **All Components** per visualizzare gli inserimenti per tutti gli analiti nella Statistics Table. Selezionare un singolo componente per visualizzare solo gli inserimenti ad esso relativi. Se l'utente seleziona un singolo standard interno dall'elenco, la Statistics Table è vuota. Fare riferimento alla sezione: [Elenco dei componenti e dei gruppi](#).

- Fare clic su una delle celle **Value** per una riga visibile nel riquadro Statistics per selezionare la riga corrispondente nella Results Table per l'analita e il campione. Se il riquadro Peak Review è visibile, si collega alla Results Table e viene aggiornato quando si fa clic sulla cella.
- Ordinare le statistiche facendo clic su una delle intestazioni di colonna.
- Copiare la Statistics Table completa o solo le righe desiderate selezionando le righe e premendo **Ctrl+C**
- Utilizzare l'elenco **Group by** per specificare il modo in cui il campione, per un determinato analita, deve essere raggruppato per il calcolo delle statistiche.
- Utilizzare l'elenco **Metric** per specificare la metrica utilizzata per il calcolo di statistiche, concentrazione calcolata, area e così via.
- Regolare le larghezze delle colonne per ottimizzare la visualizzazione. Queste larghezze sono mantenute alla successiva visualizzazione del riquadro Statistics.
- Per modificare il formato e la precisione per la Statistics Table, modificarle nella Results Table. Fare riferimento alla sezione: [Personalizzazione della Results Table](#).
- Per modificare l'opzione **Use Peak** per un singolo valore, fare clic con il pulsante destro nella cella nel riquadro Statistics e selezionare **Use Peak**. La colonna **Use Peak** nella Results Table viene aggiornata.

Vista della curva di calibrazione

Procedure preliminari
<ul style="list-style-type: none">• Aprire una Results Table.

Usare la curva di calibrazione per determinare la concentrazione di una sostanza in un campione sconosciuto confrontando quest'ultimo con un gruppo di campioni standard aventi una concentrazione nota. Fare riferimento alla sezione: [Curve di calibrazione](#).

1. Fare clic su **Displays the Calibration Curve** (.
2. Per impostare le opzioni di regressione, fare clic su **Regression**. Fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Esportazione della calibrazione

Utilizzare Export Calibration per salvare una copia dell'equazione di calibrazione per tutti gli analiti associati alla Results Table attiva in un file esterno (mqcal). In questo modo, l'utente può applicare la calibrazione da una serie di campioni standard ad altri campioni che non fanno parte della stessa Results Table.

Il flusso di lavoro tipico è il seguente:

1. Creare una nuova Results Table contenente solo lo standard.
2. Usare il riquadro Peak Review per verificare la correttezza dell'integrazione.

Istruzioni operative - Elaborazione

3. Nel riquadro Calibration Curve, fare clic su **Options > Export calibration (and save results)** per salvare una copia del file di calibrazione.
4. Creare una nuova Results Table contenente campioni con concentrazione sconosciuta.
5. Nel riquadro Calibration Curve, fare clic su **Options > Assign external calibration** per applicare l'equazione di calibrazione esportata alla nuova Results Table.

Nota: Gli utenti possono anche specificare il file di calibrazione (mqcal) da applicare alla nuova Results Table.

Se si apportano modifiche alla Results Table originale, con i campioni standard, essa deve essere nuovamente esportata per salvare l'equazione di calibrazione aggiornata. Le calibrazioni precedentemente esportate non si aggiornano automaticamente.

Analisi dei dati mediante i diagrammi metrici

Procedure preliminari

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none">• Aprire una Results Table. |
|---|

Usare un Metric Plot per tracciare i valori in una colonna della Results Table rispetto al numero di riga o a un'altra colonna. Questi tracciati sono un prezioso aiuto per la revisione dei dati visivi.

Se si seleziona una colonna, il tracciato risultante mostra i valori della colonna, in funzione del numero di riga nella tabella. Se si selezionano due colonne, i valori delle colonne sono tracciati gli uni rispetto agli altri. La prima delle due colonne da selezionare contiene i valori X e la seconda i valori Y.

1. Selezionare una o due colonne nella Results Table.

Suggerimento! Per selezionare una seconda colonna, premere **Ctrl** mentre si fa clic sull'intestazione della colonna.

2. Fare clic su **More > Create Metric Plot with new settings**.
3. Nel diagramma delle metriche, fare clic su **Link**, quindi su **Link to results table columns** o su **Link to results table rows** per collegare lo scorrimento nella Results Table al diagramma delle metriche.

Per ulteriori informazioni sul menu **Link**, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

4. Per aggiornare il diagramma delle metriche, selezionare le righe interessate nella Results Table e, nel diagramma delle metriche, fare clic su **Link > Plot selected rows only**.

Suggerimento! Per selezionare più righe, premere **Ctrl** mentre si selezionano le righe.

5. (Opzionale) Personalizzare le opzioni del diagramma delle metriche selezionandole dal menu **Options**. Per le descrizioni delle opzioni, fare riferimento al documento: *Guida in linea*.

Suggerimenti per Metric Plot

- Se l'utente fa clic con il pulsante sinistro su un punto dati, la riga corrispondente nella Results Table viene selezionata automaticamente e fatta scorrere nella visualizzazione. Se il riquadro Peak Review è aperto, si aggiorna per mostrare il cromatogramma corrispondente. Ciò fornisce un comodo metodo per eseguire la revisione dei picchi per valori anomali.
- L'area del titolo mostra sempre il nome della traccia attiva. Se le tracce di più componenti sono sovrapposte, facendo clic sul segno più (+) a sinistra del titolo è possibile alternare la visualizzazione delle informazioni di tutte le tracce oppure solo di quelle attive. Attivare la traccia specifica facendo clic sul titolo o sul punto colorato a sinistra del titolo corrispondente oppure selezionando un punto dati nel metric plot.
- Il metric plot può essere utilizzato per tracciare aree di picco per standard interni o campioni QC per monitorare possibili deviazioni o tendenze.

Modifica dei modelli di report

ATTENZIONE: Rischio di perdita di dati. Per evitare che gli utenti modifichino i modelli, assicurarsi che i modelli Reporter vengano posti in cartelle sicure, di sola lettura, accessibili per la scrittura solo da parte degli amministratori di sistema.

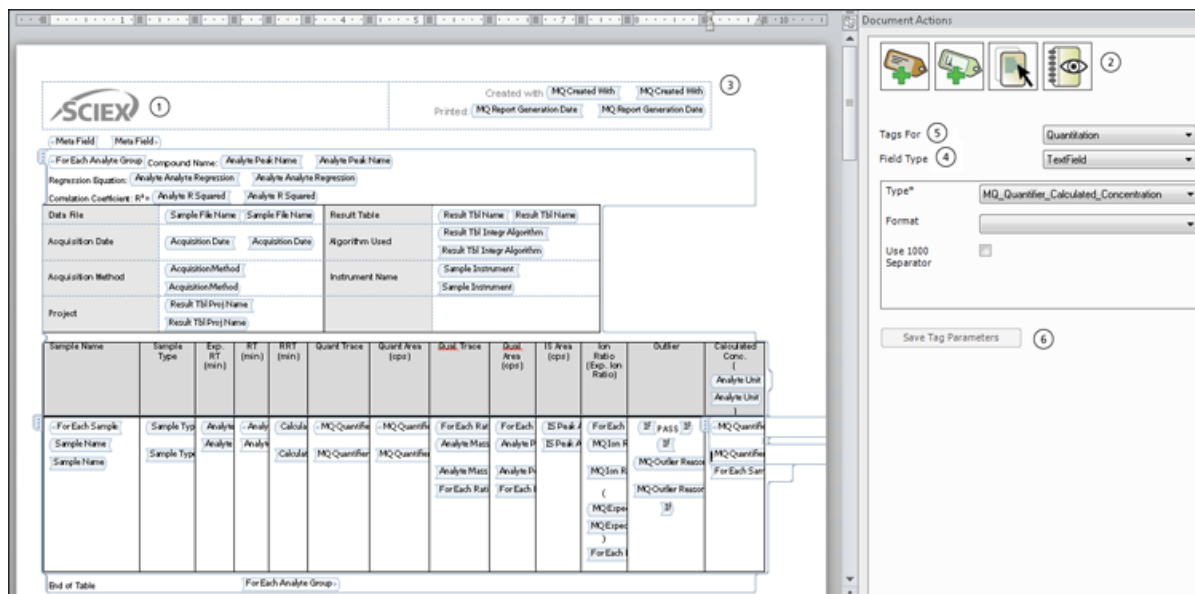
L'utente è responsabile della convalida del modello personalizzato.

1. Aprire il modello docx.

Suggerimento! I modelli si trovano in
C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter.

Quando è selezionata un'area, l'editor del modello Reporter si apre a destra. L'editor del modello viene automaticamente compilato con le informazioni sui tag.

Figura 6-34: Editor del modello Reporter



Elemento	Descrizione
1	Modello di report che mostra i tag correnti.
2	Icone: <ul style="list-style-type: none"> • Add new tag • Add picture tag • Show content area • View document change log
3	Created with: mostra il nome del software che fornisce le informazioni sui tag.
4	Field Type: mostra i tipi di campi applicabili al software.
5	Mostra un elenco di attributi disponibili sulla base del tipo di campo selezionato. Per esempio, nome tag e formato numero.
6	Save Tag Parameters: fare clic per salvare le modifiche. Se le modifiche non vengono salvate, appare un messaggio che chiede all'utente di salvarle.

2. Utilizzare le procedure nella tabella seguente.

Tabella 6-10: Funzioni di Reporter

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Modificare il tipo di campo.	Fare clic sul tag, selezionare un nuovo tipo di campo, quindi selezionare gli attributi.
Modificare gli attributi del tipo di campo.	Fare clic sulla scheda e modificare gli attributi come richiesto.
Aggiungere un tag.	Fare clic sull'icona Add new tag , selezionare il Field Type, quindi selezionare gli attributi.
Aggiungere un'immagine.	Fare clic sull'icona Add picture tag e selezionare gli attributi.
Mostrare dove un tag inizia e finisce.	Fare clic sull'icona Show content area .
Mostrare il registro di modifica del documento.	Fare clic sull'icona View document change log .
Copiare e incollare i tag.	Copiare i tag selezionati e incollarli nella nuova posizione. Aggiornare gli attributi del tipo di campo. Gli attributi non sono copiati e devono essere selezionati.
Navigare tra i tag.	Utilizzare i tasti freccia sinistra e destra per spostarsi tra i tag.
Eliminare i tag.	Eseguire una delle seguenti operazioni: <ul style="list-style-type: none"> • Se il cursore si trova a sinistra del tag, premere Delete. • Se il cursore si trova a destra del tag, premere Backspace.

3. Fare clic su **Save Tag Parameters** dopo ogni modifica.

Suggerimento! Le informazioni obbligatorie sono indicate da un punto esclamativo rosso lampeggiante a sinistra del campo.

Modelli Reporter

L'utente ha la responsabilità di convalidare il modello di report personalizzato.

Alcuni modelli di rapporti usano query. Gli utenti possono creare query usando formule basate su Microsoft Excel per valutare, manipolare e presentare i dati dalla Results Table in un report. Il contrassegno Metafield nel modello del report indica al report il nome del file query che deve usare. Per usare le query, il nome del file query deve essere specificato nel contrassegno MetaField nel modello di report. Le query devono anche avere l'estensione ".query" per essere riconosciute come tali. Le query devono essere memorizzate nella cartella Reporter dove sono memorizzati i modelli dei rapporti.

Istruzioni operative - Elaborazione

Si raccomanda all'utente di convalidare i risultati generati quando si utilizza un modello Reporter, specialmente quando si utilizzano le query in un modello. Se si apportano modifiche al modello del report dopo la convalida, il modello del report dovrà essere riconvalidato. Le modifiche al modello del report includono qualunque modifica ai contrassegni o alle query di reporter.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
All Peaks Qual	Report che mostra, per ciascun campione, una sezione che include le informazioni sul file, le informazioni sul campione, Results Table dell'analita e i cromatogrammi sovrapposti di tutti gli analiti e dello standard interno. La Results Table dell'analita è stampata come mostrato nella Results Table. Tutti i semafori di confidenza qualitativa vengono elencati all'inizio della tabella.	N/A
Analyte 20 percent Report	Report che per ogni analita mostra una sezione contenente informazioni sui file e una tabella XIC per ogni campione Blank, Standard, QC e 20% di tutti gli sconosciuti.	Questo è un modello di report di esempio con una query allegata: Analyte20percent.Query.
Analyte Summary	Tabella dei risultati che mostra nome del campione, concentrazioni calcolate e valori anomali per tutti i campioni nel lotto per l'analita specifico e lo standard interno associato.	N/A

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
Calibration Curve	Report che mostra informazioni sul file, tabella delle statistiche (standard) e curva di calibrazione per gli analiti, una pagina per ogni analita.	<ul style="list-style-type: none"> • Gli standard per i quali la casella di controllo Reportable è deselezionata non verranno inclusi nella tabella dati. Le statistiche non saranno influenzate dallo stato Reportable. • Il report mostrerà l'equazione di regressione e il grafico, come mostrato e calcolato nel riquadro Calibration Curve nell'area di lavoro Analytics, in base allo stato della colonna Used.
Intact Quant All Peaks and Graphs	Report che mostra le voci della Results Table per ogni campione. Tutte le colonne visibili nella Results Table sono mostrate nel report. Il report include anche cromatogramma XIC, spettro medio e spettro di ricostruzione per ogni campione e analita.	Questo report è specifico del flusso di lavoro Mass Reconstruction.
Intact Quant Analyte Summary and Calibration Curve	Report che mostra le voci della Results Table, la curva di calibrazione e i dati statistici per ogni analita. La Results Table include nome del campione, tipo di campione, nome dell'analita, concentrazione effettiva, area, altezza, MW previsto, MW, delta MW, concentrazione calcolata e accuratezza.	Questo report è specifico del flusso di lavoro Mass Reconstruction.
Intact Quant Sample Summary	Report che mostra le voci della Results Table per tutti i campioni. La Results Table include nome del campione, tipo di campione, nome dell'analita, concentrazione effettiva, area, altezza, MW previsto, MW, delta MW, concentrazione calcolata, accuratezza e accettazione dell'accuratezza.	Questo report è specifico del flusso di lavoro Mass Reconstruction.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
Metric Plot	Report che mostra, per ogni analita, una sezione comprendente le informazioni sul file e un diagramma delle metriche dell'area di picco.	Lo stato della casella di controllo Reportable non incide sul contenuto nel report. Tutti i punti dati sono inclusi se le caselle di controllo sono deselezionate.
MQ Analyte Report 1	Report che mostra, per ogni analita, una sezione contenente informazioni sui file, Results Table del campione e tabella XIC per ogni campione - VENGONO IN GENERE STAMPATE 2 PAGINE PER ANALITA PER < 8 CAMPIONI	N/A
MQ Analyte Report 2	Report che mostra, per ogni analita, una sezione contenente informazioni sui file e tabella XIC per ogni campione sconosciuto - VENGONO IN GENERE STAMPATE 2 PAGINE PER ANALITA PER < 8 CAMPIONI	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Analyte Report 3	Report che mostra, per ogni analita, una sezione contenente informazioni sui file e una tabella di riepilogo per i campioni sconosciuti.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Analyte Report condensed table	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati. La tabella appare su due colonne per visualizzare un maggior numero di campioni per pagina.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Analyte Report with chromatograms	Report che, per ogni analita, mostra una sezione contenente informazioni sui file, Results Table del campione e un piccolo cromatogramma per ogni campione.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Blank Template	N/A	Nel report sono riportate solo le intestazioni, il logo e i numeri di pagina.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Pep Quant	N/A	Per l'uso con il set di dati Peptide Quantitation. Fare riferimento al secondo esempio, l'esempio sulla quantificazione assoluta, della <i>Guida per utente</i> del software MultiQuant.
MQ QC Summary 1 with flags	Report che mostra informazioni sui file, tabella di riepilogo QC per analita (i valori con CV superiore al 20% sono evidenziati) e tabella con i risultati dettagliati QC (i valori con precisione non compresa nell'intervallo 80-120% sono evidenziati).	I controlli di qualità la cui casella di controllo Reportable è deselezionata non verranno inclusi nel report, né verranno utilizzati nei calcoli.
MQ Sample Report 1	Report che mostra, per ogni campione, una sezione che include informazioni sui file, informazioni sui campioni, informazioni IS, Results Table dell'analita, tabella XIC comprendente IS e ogni analita - VENGONO IN GENERE STAMPATE 2 PAGINE PER CAMPIONE PER < 8 CAMPIONI	N/A
MQ Sample Report 2	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione che include informazioni sui file, TIC, dettagli sul campione, XIC dell'analita e risultati in formato di tabella - VENGONO IN GENERE STAMPATE 2 PAGINE PER CAMPIONE PER < 8 CAMPIONI	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Sample Report 3	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Sample Report condensed table	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati. La tabella appare su due colonne per visualizzare un maggior numero di analiti per pagina.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.
MQ Sample Report with chromatograms	Report che, per ogni campione, mostra una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione, Results Table dell'analita e un piccolo cromatogramma per ogni campione.	Solo gli sconosciuti vengono inclusi nel report.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Sample Report with Concentration Threshold	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati	<ul style="list-style-type: none"> • Il file di query associato è Sample Report with Concentration Threshold.query. • I componenti devono essere denominati "Cmpd X #", dove X è un carattere qualsiasi da A a F e # è un valore numerico qualsiasi. Esempio: nel report, un componente denominato "Cmpd A 1" verrà visualizzato sotto l'intestazione Compound Group A, un componente denominato "Cmpd B 1" verrà visualizzato sotto Compound Group B e così via. • Se i componenti si trovano nello stesso gruppo, solo il primo componente del gruppo in ordine alfabetico verrà incluso nel report. Esempio 1: se "Cmpd B 25" e "Cmpd C 1" appartengono entrambi al gruppo "Grp", "Cmpd C 1" non verrà incluso nel report. Esempio 2: se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e Cmpd A 3" non sono assegnati a gruppi, "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" non saranno presenti nel report. Esempio 3: se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e Cmpd A 3" sono assegnati rispettivamente ai gruppi 1, 2 e 3, tutti e tre i componenti saranno inseriti nel report sotto l'intestazione Compound Group A.

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Sample Report with MRM ratios 2	Report che, per ogni campione sconosciuto, mostra una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sui campioni, una tabella di riepilogo dei risultati e una sovrapposizione di tutti i XIC. I rapporti ionici previsti vengono calcolati automaticamente usando qualunque standard disponibile. I valori dei rapporti vengono inseriti in colonne personalizzate all'interno della Results Table. Qualunque valore che non corrisponde al 20% del valore previsto viene segnalato. I nomi degli analiti quantificatori devono terminare con uno spazio vuoto seguito dal numero 1. I nomi dei rapporti ioni per analita devono terminare con uno spazio vuoto seguito da un numero compreso tra 2 e 9.	N/A
MQ Sample Report with MRM ratios EU	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati. I rapporti ionici previsti vengono calcolati automaticamente usando qualunque standard disponibile. I valori dei rapporti vengono inseriti in colonne personalizzate all'interno della Results Table. Qualunque valore non corrispondente ai valori previsti viene segnalato (utilizzo delle linee guida UE per le tolleranze dei rapporti). I nomi degli analiti quantificatori devono terminare con uno spazio vuoto seguito dal numero 1. I nomi dei rapporti ioni per analita devono terminare con uno spazio vuoto seguito da un numero compreso tra 2 e 9.	Il file di query associato è <code>MRM ratios EU.query</code> .

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Sample Report with MRM ratios MQ EFAB 03	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati. I rapporti ionici previsti vengono calcolati automaticamente usando qualunque standard disponibile. I valori dei rapporti vengono inseriti in colonne personalizzate all'interno della Results Table. Qualunque valore che non corrisponde al 20% del valore previsto viene segnalato. I nomi degli analiti quantificatori devono terminare con uno spazio vuoto seguito dal numero 1. I nomi dei rapporti ioni per analita devono terminare con uno spazio vuoto seguito da un numero compreso tra 2 e 9.	N/A
MQ Sample Report with MRM ratios	Report che mostra, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione e una tabella di riepilogo dei risultati. I rapporti ionici previsti vengono calcolati automaticamente usando qualunque standard disponibile. I valori dei rapporti vengono inseriti in colonne personalizzate all'interno della Results Table. Qualunque valore che non corrisponde al 20% del valore previsto viene segnalato. I nomi degli analiti quantificatori devono terminare con uno spazio vuoto seguito dal numero 1. I nomi dei rapporti ioni per analita devono terminare con uno spazio vuoto seguito da un numero compreso tra 2 e 9.	Il file di query associato è <code>MRM ratios.query</code> .

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
MQ Sample Report with standards, QC, and blanks	Report che mostra, per ogni campione, una sezione contenente informazioni sui file, tabella di riepilogo degli standard, tabella di riepilogo QC, Results Table dei bianchi e, per ogni campione sconosciuto, una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sul campione, informazioni IS, Results Table dell'analita, tabella XIC comprendente e IS e ogni analita - VENGONO IN GENERE STAMPATE 2 PAGINE PER CAMPIONE PER < 8 ANALITI.	Gli standard e i controlli di qualità la cui casella di controllo Reportable è deselezionata non verranno mostrati nelle rispettive tabelle di riepilogo nel report, né verranno utilizzati nei calcoli statistici.
MQ Tutorial Dataset Heavy Light	N/A	Questo report è previsto per l'uso con il set di dati Tutorial Dataset Heavy Light. Fare riferimento al secondo esempio, l'esempio sulla quantificazione relativa, della <i>Guida per utente</i> del software MultiQuant.
Per Sample Quant-Qual	Report che, per ogni campione selezionato, mostra una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sui campioni e una Results Table sugli analiti per gli analiti selezionati. La Results Table dell'analita è stampata come mostrato nella Results Table. Tutti i semafori di confidenza qualitativa vengono elencati all'inizio della tabella.	N/A

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	Report che, per ogni campione selezionato, mostra una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sui campioni e una Results Table sugli analiti per gli analiti selezionati. La Results Table dell'analita è stampata come mostrato nella Results Table. Tutti i semafori di confidenza qualitativa vengono elencati all'inizio della tabella.	Lo stato nascosto di una riga ha la precedenza sullo stato della casella di controllo Reportable . Se la casella di controllo Reportable è selezionata ma la riga è nascosta, la riga non viene inserita nel report.
Per sample Quant-Qual with statistics	Un report che mostra componenti per ogni campione con una tabella WYSIWYG. Sono riportati XIC, MS e MS/MS. Una tabella di riepilogo delle statistiche è riportata alla fine del report.	<ul style="list-style-type: none"> • Se la tabella dei componenti include componenti UV, la traccia UV è indicata sotto il grafico XIC nel report. <hr/> <p>Nota: Se il nome del componente UV ha il formato [compound_nameuv] o [uv], non vengono segnalate tracce UV, perché il suffisso uv è associato al report UV MS Qual.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> • Se un campione è etichettato come QC e vi sono 2 o più campioni, media, STDEV e %CV verranno calcolati e inclusi in una tabella di riepilogo QC alla fine del report. • Se la casella di controllo Reportable è deselezionata per una riga QC, tale riga non verrà utilizzata per alcun calcolo nella tabella di riepilogo QC.
Per Analyte Quant-Qual	Report che mostra, per ogni analita, una sezione comprendente le informazioni sul file, la Results Table, le curve di calibrazione e i cromatogrammi, inclusi lo standard interno e ciascun analita. Questo modello è adatto per una Results Table con un gruppo definito.	N/A

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
Positive Hits Qual	Report che mostra, per ciascun campione selezionato, una sezione che include le informazioni sul file, le informazioni sul campione, la Results Table sugli analiti per gli analiti selezionati, i cromatogrammi sovrapposti di tutti gli analiti, lo standard interno e il XIC, lo spettro MS acquisito/teorico e gli spettri MS/MS acquisiti/teorici per ciascun analita selezionato. La Results Table dell'analita è stampata come mostrato nella Results Table. Tutti i semafori di confidenza qualitativa vengono elencati all'inizio della tabella.	N/A
Qual CSV report	Report in formato csv che mostra, per ogni campione selezionato, una sezione che include le informazioni sul file, le informazioni sul campione e la Results Table degli analiti.	Consigliato per utilizzare l'opzione CSV per il formato di report.
Sample Summary	Report che mostra, per ogni campione, una sezione della Analytes Summary Table. Questo modello di report è adatto per una Results Table con gruppi.	N/A

Tabella 6-11: Modelli predefiniti (continua)

Modello	Descrizione del modello (come riportata nella finestra di dialogo Create Report)	Note aggiuntive
Report UV MS Qual	Report che mostra, per ogni campione, i componenti di tale campione e il loro rispettivo componente UV con una tabella WYSIWYG. Sono riportati XIC, MS e MS/MS insieme ai dati UV. Una tabella di riepilogo delle statistiche è riportata alla fine del report.	<ul style="list-style-type: none"> • I dati UVMS devono essere elaborati con la convenzione di denominazione <i>compound 1</i> (Qualsiasi stringa) per il componente spettrometro di massa (MS) e <i>compound 1uv</i> (qualsiasi stringa più uv) per il componente UV corrispondente. • Sono mostrati solo i semafori di errore di massa, errore di massa dei frammenti, confidenza RT, confidenza isotopo e confidenza libreria. • Viene creata una tabella grafica per mostrare i singoli componenti nella Results Table, inclusi XIC, traccia MS1, traccia MS/MS e intestazione dal composto 1 e traccia UV dal composto 1uv. Fare riferimento a Figura 6-35. • I grafici degli analiti sono solo ripetuti per gli esperimenti MS, non per gli esperimenti UV. • Se un campione è etichettato come QC e vi sono 2 o più campioni, media, STDEV e %CV vengono calcolati e inclusi in una tabella di riepilogo QC alla fine del report. Fare riferimento a Figura 6-36. • Se la casella di controllo Reportable è deselezionata per una riga QC, tale riga non verrà utilizzata per alcun calcolo nella tabella di riepilogo QC.

Istruzioni operative - Elaborazione

Figura 6-35: Tabella dei grafici

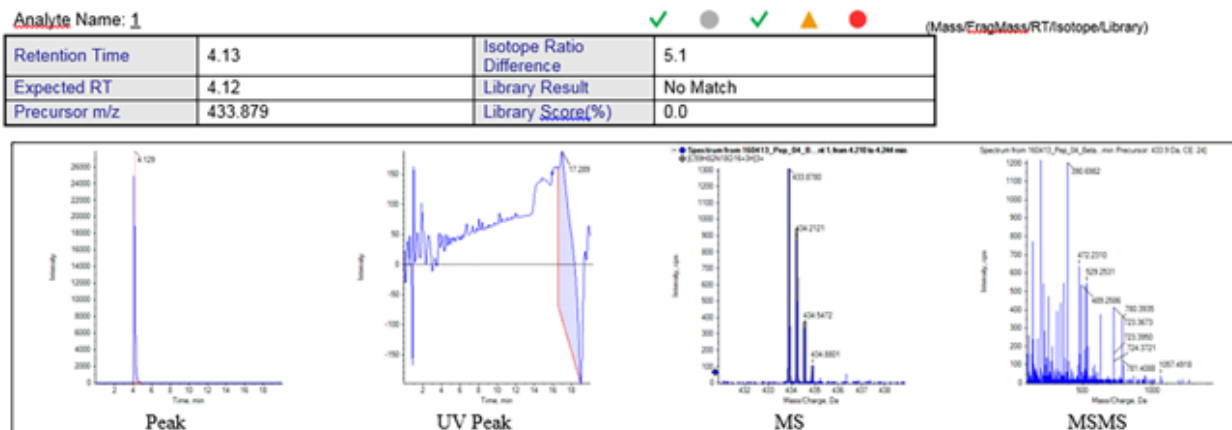


Figura 6-36: Tabella delle statistiche

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

Quando si verifica un errore, il software Central Administrator Console (CAC) registra gli errori e gli avvisi mostrati sullo schermo. L'area di lavoro Event Log contiene i registri degli eventi di sistema che includono errori, avvertenze e messaggi.

Per aprire questa area di lavoro, fare clic sul riquadro Event Log nella pagina Home.

Tabella 7-1: Colonne dell'area di lavoro Event Log

Etichetta	Descrizione
Current	(Corrente) Un elenco degli eventi correnti di ciascun sottosistema.
Severity	(Gravità) Il tipo di evento: informazioni, errore o avvertenza.
Time	(Momento) Momento in cui si è verificato l'evento
Subsystem	(Sottosistema) Sottosistema in cui si è verificato l'evento.
Event	(Evento) Descrizione dell'evento. Queste informazioni possono essere utilizzate per risolvere i problemi del sistema.
User	(Utente) Nome dell'utente e il sistema in cui si è verificato l'evento. Nota: Per gli eventi attivati da una regola di decisione, questo è l'utente che ha inviato il lotto.

Log eventi

Sono disponibili i log seguenti:

- **All** (Tutti)
- **Device** (Dispositivo)
 - **LC** (LC)
 - **Mass Spectrometer** (Spettrometro di massa)
- **Workspace** (Area di lavoro)
 - **Batch** (Lotto)
 - **Explorer** (Esplora)
 - **Devices** (Dispositivi)
 - **General** (Generale)
 - **LC Method** (Metodo LC)
 - **MS Method** (Metodo MS)

Eventi

- **MS Tune** (Tuning MS)
- **Analytics** (Analisi)
- **Queue** (Coda)
- **Users** (Utenti)
- **Configuration** (Configurazione)

Quando il log eventi contiene 20.000 record, SCIEX OS archivia automaticamente i record e ne inizia uno nuovo. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla sezione: [Archivi dei log eventi](#).

Visualizzazione dei registri

1. Aprire l'area di lavoro Event Log.
2. Fare clic su una voce dell'elenco nel pannello sinistro per visualizzare i registri.

Archiviazione dei registri

1. Aprire l'area di lavoro Event Log.
2. Fare clic su **Archive > Archive Log**.

Figura 7-1: Menu Archive: Archive Log

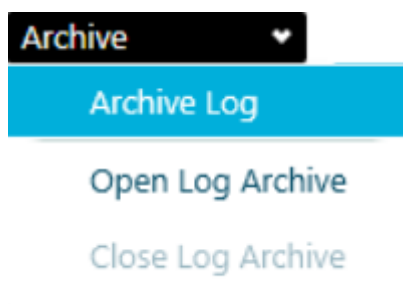
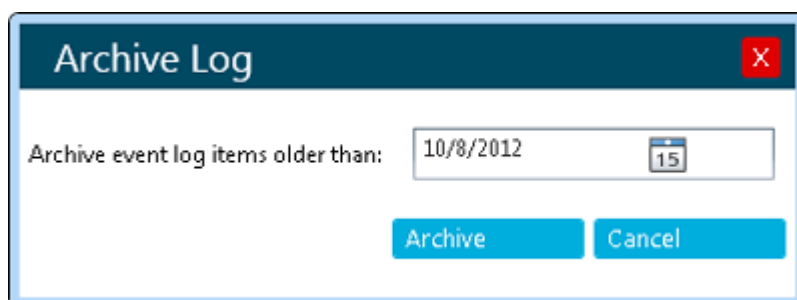


Figura 7-2: Finestra di dialogo Archive Log

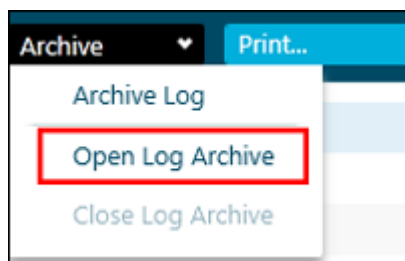


3. Nel campo **Archive event log items older than**, fare clic sull'icona della data e selezionare una data.
4. Fare clic su **Archive**.

Visualizzazione dei registri archiviati

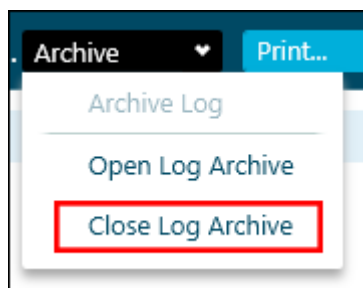
1. Aprire l'area di lavoro Event Log.
2. Fare clic su **Archive > Open Log Archive**.

Figura 7-3: Menu Archive: Open Log Archive



3. Aprire il file richiesto.
4. Fare clic su **Archive > Close Log Archive**.

Figura 7-4: Menu Archive: Close Log Archive



Stampa dei registri

1. Aprire l'area di lavoro Event Log.
2. (Opzionale) Aprire un registro archiviato. Fare riferimento alla sezione: [Visualizzazione dei registri archiviati](#).
3. Fare clic su **Print**.
Si apre la finestra di dialogo Print.
4. Selezionare una stampante, quindi fare clic su **Print**.

Archivi dei log eventi

I record evento vengono registrati nei log eventi e possono creare file di grandi dimensioni di difficile gestione e consultazione.

Quando un log eventi raggiunge 20.000 record, viene archiviato. Quando al log eventi viene aggiunto un record evento finale, il log eventi viene salvato con un nome file che indica il tipo

Eventi

di log eventi e la data e l'ora. Viene creato un nuovo log eventi. Il primo record del nuovo log eventi indica che il log eventi è stato archiviato.

Gli archivi dei log eventi sono archiviati nella cartella

C:\ProgramData\SCIEX\Clearcore2.Acquisition. I nomi file presentano il formato <logfile>Archive_<YYYYMMDD>_<HHMMSS>.data. Ad esempio, CustomerLogArchive_20220427_172915.data.

Questa sezione spiega come utilizzare la funzione di auditing.

Visualizzazione dei record audit trail

1. Aprire l'area di lavoro Audit Trail.
2. Per visualizzare l'audit trail per la workstation, fare clic su **Workstation** nel riquadro a sinistra.
3. Per visualizzare l'audit trail per un progetto, selezionare il progetto nel riquadro a sinistra. Dopodiché, selezionare una delle seguenti opzioni:
 - **General Events:** per mostrare i record di audit applicabili all'intero progetto, come le modifiche alla mappa di audit e l'acquisizione di campioni.
 - **Analytics:** per mostrare i record di audit per una Results Table.
 - **All Project Events:** per mostrare i record di audit per gli eventi generali e gli eventi di elaborazione.

Filtraggio degli eventi controllati utilizzando la ricerca per parola chiave

L'utente può filtrare gli eventi controllati nell'audit trail utilizzando una ricerca per parola chiave. La ricerca evidenzia ogni occorrenza del testo.

1. Aprire l'area di lavoro Audit Trail.
2. Selezionare l'audit trail da cercare. Fare riferimento alla sezione: [Visualizzazione dei record audit trail](#).
Vengono visualizzati i record degli audit trail.
3. Digitare la parola da cercare nel campo **Find in Page**.
Tutte le occorrenze di una parola nella pagina vengono evidenziate.
4. Utilizzare i pulsanti Next (▼) e Previous (▲) per spostarsi tra le corrispondenze.

Filtraggio degli eventi controllati utilizzando un insieme di criteri specificati

L'utente può filtrare gli eventi controllati nell'audit trail utilizzando un insieme di criteri specificati.

1. Aprire l'area di lavoro Audit Trail.
2. Selezionare l'audit trail da filtrare. Fare riferimento alla sezione: [Visualizzazione dei record audit trail](#).

Auditing

Vengono visualizzati i record degli audit trail.


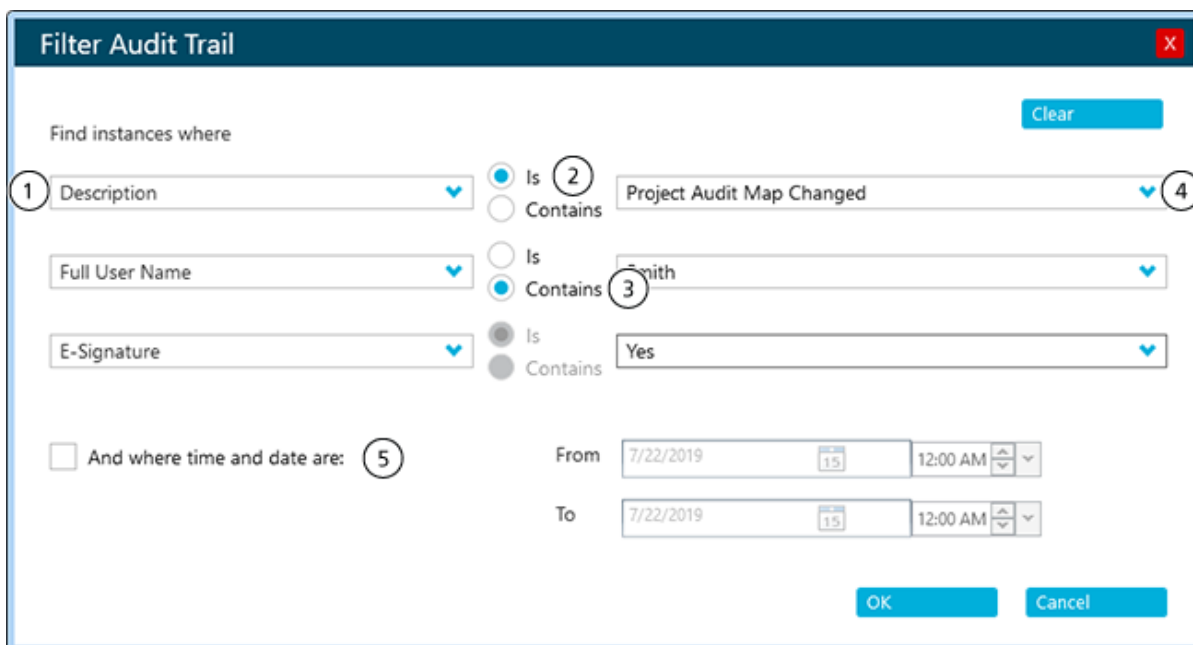

3. Fare clic su **Filter** ().
Viene aperta la finestra di dialogo Filter Audit Trail.
4. Usare gli elenchi per definire i criteri di filtraggio richiesti.

Figura 8-1: Finestra di dialogo Filter Audit Trail



Elemento	Descrizione
1	Nell'elenco <No Filter> , selezionare il campo da filtrare. I campi seguenti sono disponibili per il filtraggio: <ul style="list-style-type: none">• Description• Sample Name• Full User Name• E-Signature• Reason
2	Selezionare per filtrare in base a una parola o frase esatta.
3	Selezionare per filtrare in base a una parte di una parola o frase.
4	Specificare il testo da filtrare, come segue: <ul style="list-style-type: none">• Digitare la stringa di testo completa. Selezionare Is (elemento 2).• Digitare una stringa di testo parziale. Selezionare Contains (elemento 3).• Selezionare Yes o No.

Elemento	Descrizione
5	Consente di filtrare in base agli eventi che si sono verificati durante una data e un'ora specifica.

5. Per eliminare il filtro, procedere come segue:
 - a. Fare clic su **Filter** ().
 - b. Fare clic su **Clear** per ripristinare i criteri di filtro su **No Filter**.
 - c. Fare clic su **OK**.

Stampa di un audit trail

1. Aprire l'area di lavoro Audit Trail.
2. Selezionare l'audit trail da stampare. Fare riferimento alla sezione: [Visualizzazione dei record audit trail](#).
3. Fare clic su **Print**.
Si apre la finestra di dialogo Print.
4. Selezionare una stampante, quindi fare clic su **Print**.

Principio di funzionamento— Software

A

Questa sezione descrive i concetti utilizzati nel software.

Gestione dei dati

Il software SCIEX OS richiede un computer che esegue il sistema operativo Windows 7 a 64 bit o Windows 10 a 64 bit. Il computer e il software di sistema associato funzionano con il controller di sistema e il firmware pertinente per controllare il sistema e l'acquisizione dei dati. Durante il funzionamento del sistema, i dati acquisiti vengono inviati al software SCIEX OS dove possono essere visualizzati come spettri di massa completi, intensità degli ioni singoli o multipli rispetto al tempo o corrente di ionizzazione totale rispetto al tempo.

Tecniche di scansione

Questo sistema è versatile ed affidabile per l'esecuzione delle analisi di spettrometria di massa con cromatografia liquida sui flussi di campione liquido al fine di identificare, quantificare ed esaminare i composti.

Per analizzare i campioni il sistema utilizza le seguenti tecniche di spettrometria di massa:

- Due modalità di spettrometria di massa singola (MS):
 - Spettrometria di massa singola basata su quadrupoli (solo per la calibrazione Q1)
 - Spettrometria di massa singola basata sulla durata del passaggio
- Una modalità di spettrometria di massa tandem (MS/MS):
 - Spettrometria di massa degli ioni prodotto

Vista dati diversa

Cromatogrammi

Un cromatogramma mostra la variazione di una certa quantità rispetto al tempo in un esperimento ripetitivo. Ad esempio, quando lo strumento è programmato per ripetere più volte una serie di scansioni spettrali di massa. I dati cromatografici sono contigui, anche se la loro intensità è zero. I cromatogrammi non vengono generati direttamente dallo strumento, ma dagli spettri di massa.

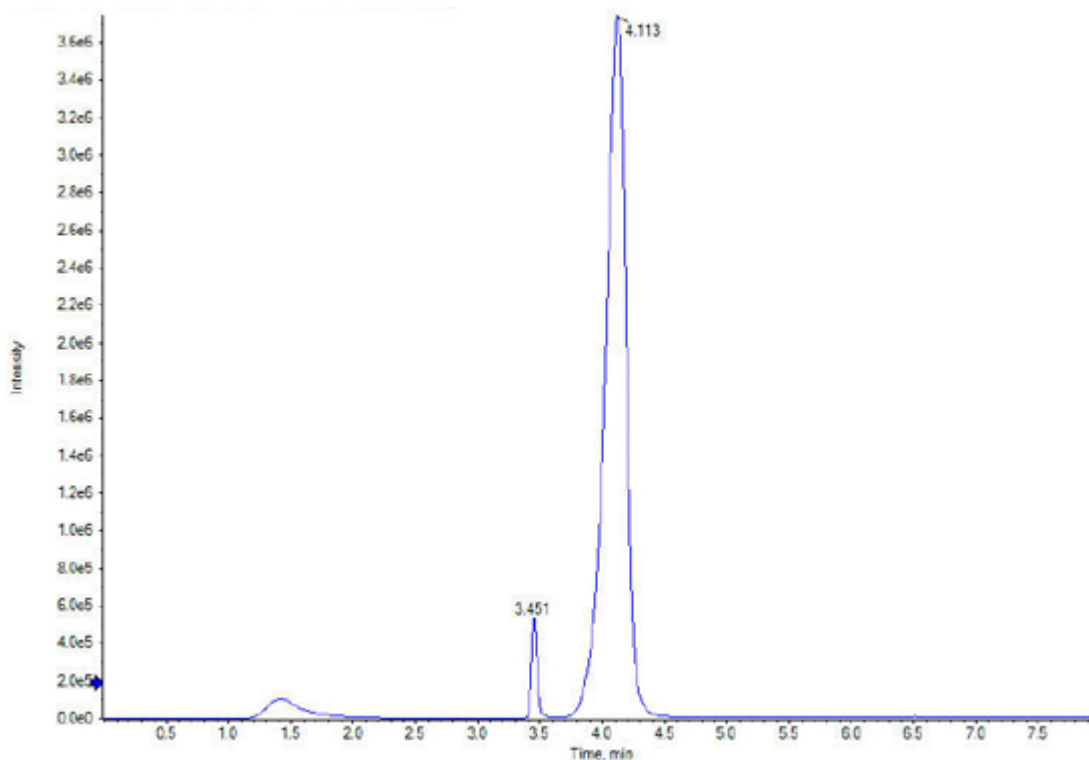
Nel grafico del cromatogramma, l'intensità viene visualizzata in conteggi al secondo (cps) sull'asse Y rispetto al tempo sull'asse X. I picchi vengono etichettati in modo automatico.

I picchi cromatografici possono variare di tempo di ritenzione e di intensità in base ai cambiamenti nelle condizioni cromatografiche per un dato campione.

Il software mostra i seguenti tipi di cromatogrammi:

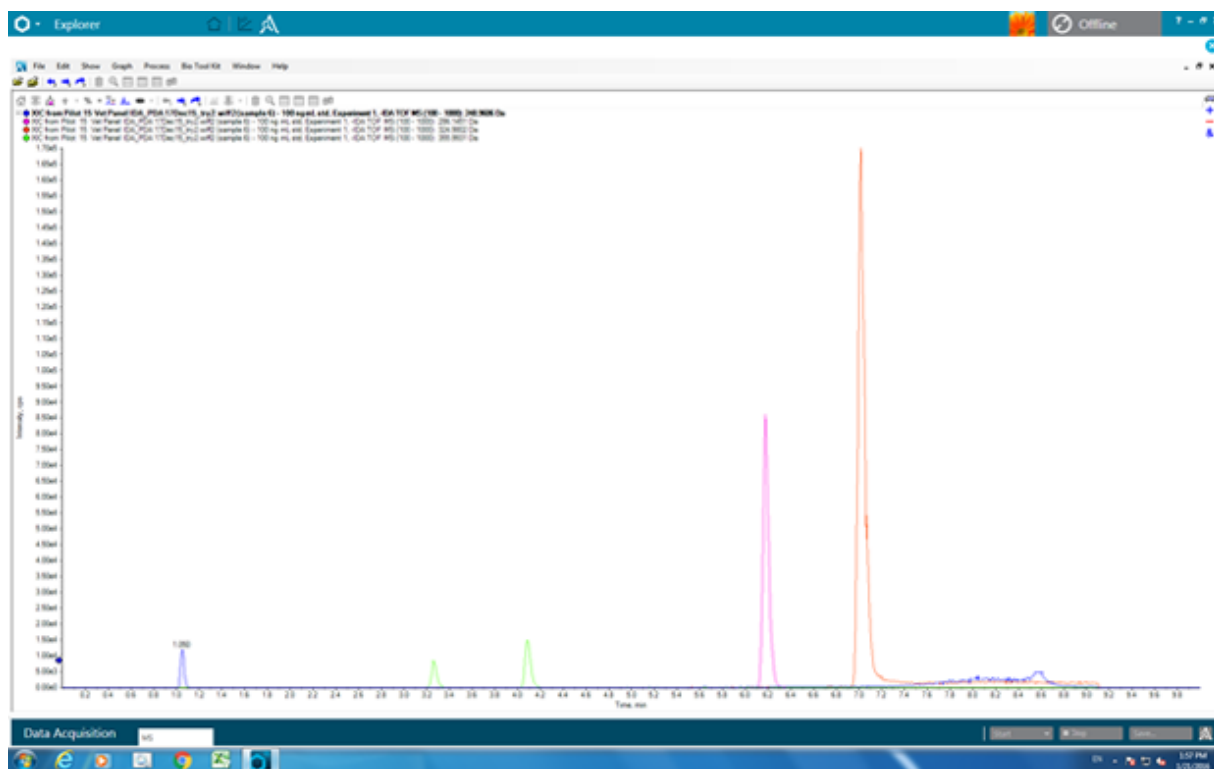
- **TIC:** tracciato della corrente ionica totale in funzione del tempo.

Figura A-1: Esempio di TIC



- **XIC:** cromatogramma degli ioni creato prendendo da una serie di scansioni spettrali di massa i valori di intensità a un valore unico e distinto di massa o in un range di massa. XIC indica il comportamento di una data massa, o di un intervallo di massa, in funzione del tempo.

Figura A-2: Esempio di XIC



Spettri

Uno spettro è costituito dai dati direttamente ottenuti dallo spettrometro di massa e rappresenta solitamente il numero di ioni rilevati con particolari valori del rapporto massa/carica (m/z). È visualizzato sotto forma di grafico, con i valori m/z

Quando si visualizzano i dati sotto forma di spettro, si ottengono informazioni specifiche per la massa di un composto. Uno spettro fornisce i valori m/z per gli ioni corrispondenti a un particolare picco cromatografico. Questi ioni possono essere utilizzati per trovare informazioni più specifiche. Ad esempio, uno spettro mostra tutte le masse che formano un picco, compresa l'intensità di ciascuna di esse.

Le intensità spettrali possono variare, ma il valore m/z è fisso poiché la massa di un composto non cambia.

Esistono due maniere per generare i dati spettrali:

- Se viene acquisita una sola scansione, i dati vengono visualizzati sotto forma di spettro.
- Da un cromatografo.

Spettri di ricostruzione

Uno spettro elaborato viene generato applicando un algoritmo di deconvoluzione a uno spettro MS o MS/MS. Gli spettri di ricostruzione sono costituiti da masse a carica zero o neutre con intensità corrispondente. Lo spettro in genere fornisce informazioni sul peso

molecolare di un composto. L'intensità spettrale può cambiare, ma le informazioni sul peso molecolare non cambiano.

Uno spettro di ricostruzione tipico viene rappresentato con la massa (Da) sull'asse X e l'intensità sull'asse Y.

Regole di decisione

Mentre un lotto viene elaborato nell'area di lavoro Queue, il software può eseguire determinate azioni correttive in risposta ai risultati di analisi specificati. Ad esempio, se un campione non soddisfa i criteri di accettazione definiti nel metodo di trattamento (risultato di analisi), è possibile impostare il software affinché inietti nuovamente il campione (azione correttiva).

Questa funzione viene implementata con regole di decisione. Una regola di decisione è composta da due parti principali:

- Una regola di segnalazione, che definisce il risultato di analisi
Le regole di segnalazione sono definite nei metodi di trattamento.
- Un'azione correttiva, che viene applicata se i risultati di trattamento non soddisfano i criteri per il risultato di analisi
Le azioni correttive includono le seguenti:
 - Interruzione della coda
 - Annullamento del lotto
 - Iniezione di un campione diverso
 - Nuova iniezione del campione segnalato

Quando crea un lotto, l'utente può attivare regole di decisione per il lotto e quindi selezionare le regole di decisione da utilizzare.

Algoritmo Dynamic Background Subtraction

L'algoritmo Dynamic Background Subtraction migliora il rilevamento degli ioni precursore in un esperimento IDA (Information Dependent Acquisition). Quando l'algoritmo viene attivato, IDA utilizza uno spettro da cui è stato sottratto il fondo per selezionare lo ione precursore di interesse per l'analisi MS/MS, anziché selezionare il precursore direttamente dallo spettro di indagine. Poiché questo processo avviene durante l'analisi LC, l'algoritmo consente il rilevamento di specie con l'aumentare di intensità del loro segnale. Come risultato, questo algoritmo si concentra sul rilevamento e l'analisi degli ioni precursore sulla parte crescente del picco LC, fino alla sommità dei picchi LC o leggermente al di sopra di questa.

Analisi quantitativa

L'analisi quantitativa è usata per determinare la concentrazione di una specifica sostanza in un campione. Analizzando un campione sconosciuto e confrontandolo con i campioni standard, ossia i campioni contenenti la stessa sostanza in concentrazioni note, il software può calcolare la concentrazione del campione sconosciuto. Il processo comporta la

creazione di una curva di calibrazione utilizzando la risposta del segnale o il rapporto di risposta degli standard e quindi calcolando le concentrazioni dei campioni sconosciuti. Le concentrazioni calcolate di tutti i campioni vengono aggiunte a una Results Table.

L'analisi quantitativa viene comunemente eseguita utilizzando una scansione Multiple Reactions Monitoring (MRM). In una scansione MRM, uno ione precursore e uno ione prodotto caratteristico vengono utilizzati per definire una transizione MRM altamente specifica dell'analita. La transizione MRM, combinata al tempo di ritenzione associato all'analita durante la cromatografia liquida garantisce la specificità richiesta per la quantificazione.

La quantificazione si realizza mediante l'uso di metodi di acquisizione MRM LC-MS/MS validati, l'acquisizione di curve di calibrazione standard e la successiva integrazione dei picchi associati ai composti in uso. Il rapporto tra risposta del segnale e concentrazione nella curva di calibrazione viene utilizzato per determinare la quantità di un particolare analita in un campione sconosciuto.

Standard Addition

La funzione Standard Addition può essere utilizzata per determinare la concentrazione di un composto in un campione in cui un effetto matrice noto impedisce l'uso di una curva di calibrazione tradizionale.

Questa funzione consente all'utente di eseguire calcoli di aggiunte standard direttamente nel software. Se la funzione Standard Addition è abilitata nel flusso di lavoro di quantificazione, il calcolo dell'aggiunta di standard viene eseguito durante l'integrazione e i risultati vengono visualizzati nella Results Table.

Se questa funzione è abilitata, questi parametri di regressione sono disabilitati:

- Regression Type
- Weighting Type
- Automatic Outlier Removal

Abilitazione della funzione Standard Addition

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
2. Fare clic su **Process Method > New**.

Suggerimento! Per modificare un metodo di trattamento esistente, fare clic su **Process Method > Edit embedded method** e attenersi alla seguente procedura.

3. Selezionare la pagina Workflow e selezionare almeno un flusso di lavoro e i campioni di riferimento.
4. Selezionare la pagina Components e definire i nomi dei componenti, le masse, gli standard interni, i gruppi, ecc.

Suggerimento! Se il gruppo è definito nella tabella Components, è possibile scegliere di sommare gli ioni nel gruppo, anche se lo ione precursore e l'indice dell'esperimento sono diversi per le transizioni. Gli ioni sommati non vengono visualizzati nella tabella ma nella pagina Integration e nella Results Table come <nome gruppo>_Sum. Questa opzione è utile per la quantificazione di proteine e peptidi.

Suggerimento! Quando il tempo di ritenzione dei componenti non è noto, impostare il **Retention Time Mode** per una massa o una formula chimica per **Find *n* peaks**, dove *n* è 1, 2, 5, 10 o tutti. Il software identifica il numero specificato di caratteristiche con l'area di picco maggiore, assegnando il tempo di ritenzione appropriato, ed esegue poi un flusso di trattamento picco mirato. Quando l'elaborazione è completa, il metodo integrato per la Results Table può essere salvato come un normale metodo mirato.

5. Selezionare la pagina Integration e i parametri di integrazione di ciascun componente.
6. Fare clic su **Options > Quantitate by standard addition**.

Questa funzione ha requisiti specifici per i seguenti campi dei lotti:

- **Sample ID:** tutti i campioni appartenenti allo stesso gruppo di aggiunta standard devono avere lo stesso ID campione.
- **Sample Type:** tutti i campioni da quantificare mediante l'aggiunta standard devono avere il tipo di campione **Standard**.
- **Actual Concentration:** questo campo deve contenere la concentrazione nota dello standard aggiunto a ciascun campione nel gruppo di aggiunta standard. Ad esempio, per campioni senza standard aggiunto, è pari a **0**. I dati di questa colonna vengono tracciati come l'asse X sulla curva di calibrazione.

Se questa funzione è abilitata, la Results Table contiene un nuovo campo **Standard Addition Accuracy** che confronta la **Standard Addition Calculated Concentration** di un campione alla **Standard Addition Actual Concentration**.

Una visualizzazione dinamica della curva di calibrazione relativamente a uno specifico campione viene mostrata nella curva di calibrazione.

Mass Reconstruction

Per le molecole di grandi dimensioni, viene in genere osservata una diffusione dello stato di carica in uno spettro di scansione completa MS. La funzione Mass Reconstruction consente all'utente di eseguire la deconvoluzione dello spettro direttamente nel software e quindi eseguire la quantificazione in base ai picchi di massa deconvoluti o a carica zero. Se la funzione Mass Reconstruction è abilitata nel flusso di lavoro di quantificazione, durante l'elaborazione vengono eseguite la ricerca dei picchi, la deconvoluzione dello spettro, la ricerca dei picchi di massa e l'integrazione, i risultati vengono quindi visualizzati nella Results Table.

Abilitazione della funzione Mass Reconstruction

Nota: La funzione Mass Reconstruction è supportata solo nel flusso di lavoro Quantitation.

Principio di funzionamento—Software

Nota: La funzione Mass Reconstruction è supportata solo per gli algoritmi di integrazione MQ4 e Summation.

Nota: Se Mass Reconstruction è abilitata, **Options > Sum Multiple Ion** è disabilitata.

1. Aprire l'area di lavoro Analytics.
2. Fare clic su **Process Method > New**.

Suggerimento! Per modificare un metodo di trattamento esistente, fare clic su **Process Method > Edit embedded method** e attenersi alla seguente procedura.

3. Selezionare la pagina Workflow e selezionare il flusso di lavoro **Quantitation** e i campioni di riferimento.
4. Selezionare la pagina Components.
5. Fare clic su **Options > Mass Reconstruction**.
6. Aggiungere i componenti, inserire le informazioni nei campi richiesti.

Nota: Il campo **Expected MW** è opzionale.

7. Fare clic su **Integration** per visualizzare la pagina Integration e rivedere il cromatogramma XIC, lo spettro medio e lo spettro di ricostruzioni e per selezionare la massa di destinazione.
8. Salvare il metodo.

Se questa funzione è abilitata, la Results Table contiene le seguenti nuove colonne: **Expected MW**, **MW**, **MW Delta (Da)**, **MW Delta (ppm)**, **IS Expected MW**, **IS MW**, **IS MW Delta (Da)** e **IS MW Delta (ppm)**.

Analisi qualitativa

L'analisi qualitativa è l'identificazione di un composto target o non noto. Nella spettrometria di massa, la determinazione del composto presente avviene tramite l'utilizzo dell'accuratezza della massa, il tempo di ritenzione, lo schema degli isotopi, la ricerca nella libreria e la ricerca della formula. Utilizzando tutti questi elementi insieme, aumenta la certezza di identificare entrambi i composti mirati e non mirati in campioni non noti.

Precisione della massa

Per riuscire a identificare un composto di destinazione noto in un campione, è utile analizzare l'accuratezza della massa di tale composto e determinare se una corrispondenza potenziale per quel composto presenta un'accuratezza della massa entro una determinata tolleranza. Ad esempio, l'imazalil ha la formula chimica $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$, che gli conferisce una massa monoisotopica di 296,0483, a quattro cifre decimali. Un addotto protonato è uno ione con una carica positiva che viene normalmente rilevato utilizzando uno spettrometro di massa. L'addotto protonato dell'imazalil ha un rapporto massa/carica (m/z) di 297,0556. Se si sospetta la presenza di imazalil in un campione, confrontare il valore m/z del composto trovato con il valore m/z dell'imazalil protonato e determinare quanto è prossima

la corrispondenza. Minore è la differenza, in ppm o Da, maggiore è la probabilità che il composto trovato sia una corrispondenza.

Tempo di ritenzione

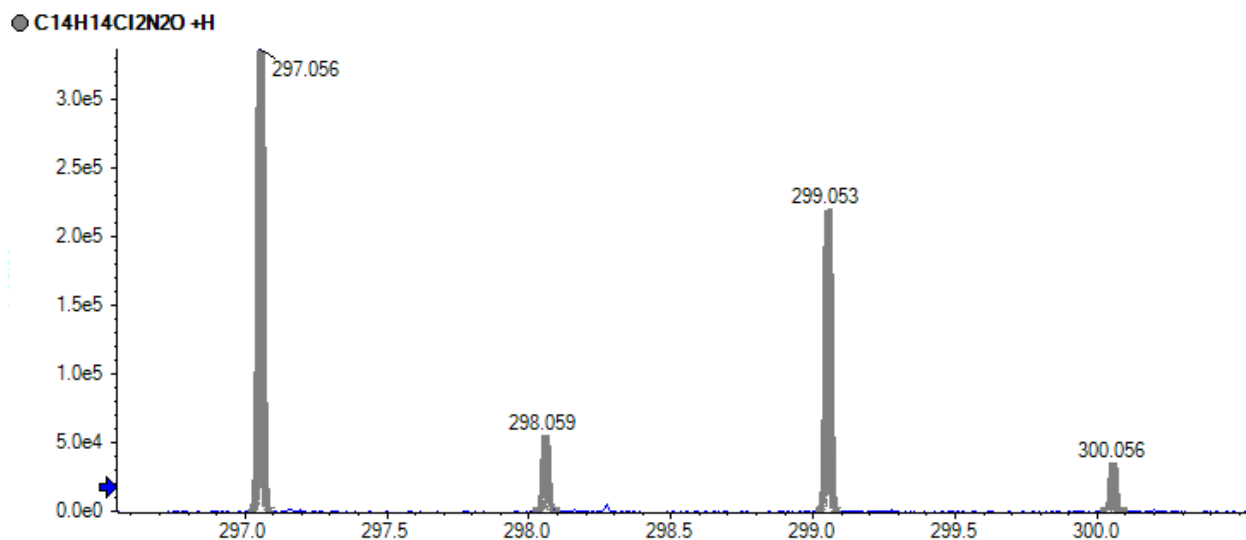
La maggior parte degli spettrometri di massa utilizzano determinati tipi di cromatografia. Il tempo di ritenzione per un composto è determinato dall'iniezione di uno standard noto del composto. Il tempo di ritenzione può essere utilizzato per identificare i composti di destinazione in un campione. Se il composto sospetto è in un campione non noto, più il tempo di ritenzione è vicino al tempo di ritenzione dello standard, maggiori sono le probabilità che il composto non noto possa essere identificato. I tempi di ritenzione possono cambiare e devono essere confermati periodicamente utilizzando uno standard noto.

Modello isotopico

Lo spettro di massa di una scansione completa ottenuta da un composto in uno spettrometro di massa ha un modello isotopico distinto basato sulla formula molecolare utilizzata.

Per il modello isotopico per l'imazalil, fare riferimento alla figura seguente.

Figura A-3: Modello isotopico (Imazalil)



Il modello isotopico per l'imazalil è formato da isotopi di massa diversa per gli elementi. Il modello isotopico viene calcolato in modo teorico e poi confrontato con quello acquisito effettivamente per il composto non noto. Più è vicina la corrispondenza tra il modello effettivo e quello teorico, maggiore è la probabilità che il composto sia stato identificato.

Ricerca nella libreria

Il confronto degli spettri MS/MS acquisiti da campioni non noti con un database di composti con spettri di riferimento rappresenta uno degli strumenti più efficaci nell'analisi qualitativa. Gli algoritmi di ricerca nella libreria confrontano gli spettri non noti del campione e tentano quindi di abbinarli ai campioni e agli spettri noti nel database. Più è vicina la corrispondenza e più alto è il punteggio indicato, maggiore è la probabilità che il composto sia stato identificato.

La purezza, l'adattamento e l'adattamento inverso vengono calcolati nel seguente modo:

- Se è presente un picco a una data massa sia nello spettro della libreria (ridotto) sia nello spettro non noto (ridotto) con un rapporto di intensità nei limiti specificati dall'utente, l'intensità del picco nello spettro della libreria è impostata sullo stesso valore dello spettro non noto.
- La purezza viene calcolata nel seguente modo:

$$100,0 (UL_{\text{totale}})^2 / (U_{\text{totale}} \cdot L_{\text{totale}}) \text{ dove:}$$

$$U_{\text{totale}} = \sum U_m \cdot U_m$$

$$L_{\text{totale}} = \sum I_m \cdot L_m$$

$$UL_{\text{totale}} = \sum U_m \cdot L_m$$

La somma include tutte le masse dove le intensità U_m ed L_m sono le radici quadrate della massa pesata che viene ridotta, le voci non nota e da libreria. È garantito che la purezza rientri nell'intervallo compreso tra 0 e 100 e che rappresenti una misura della similarità tra lo spettro nella libreria e lo spettro non noto.

- L'adattamento viene calcolato nello stesso modo utilizzato per la purezza, con la differenza che nelle somme vengono incluse solo le masse presenti nello spettro nella libreria. Questo non ha effetto su L_{totale} o su UL_{totale} poiché non viene eliminato alcun termine da queste somme. L'adattamento indica la misura in cui uno spettro nella libreria è contenuto nello spettro non noto. Un adattamento elevato e una purezza bassa indicano che lo spettro non noto è probabilmente impuro, pur contenendo il composto della libreria.
- L'adattamento inverso viene calcolato nello stesso modo utilizzato per la purezza, con la sola differenza che nelle somme vengono incluse solo le masse presenti nello spettro non noto. L'adattamento inverso indica la misura in cui lo spettro non noto è contenuto nello spettro della libreria.

Ricerca della formula

Utilizzando un numero di massa l'algoritmo di ricerca della formula tenta di prevedere la formula del composto utilizzando gli spettri MS ed MS/MS generati da uno spettrometro di massa. Un punteggio elevato di ricerca della formula non significa necessariamente che il composto nel campione sia quello identificato dall'algoritmo di ricerca della formula, poiché più formule sono spesso corrispondenti entro l'errore di massa. Prestare attenzione ed eseguire altre verifiche di conferma prima di identificare un composto utilizzando l'algoritmo di ricerca della formula.

Nota: Non è consigliabile eseguire la ricerca della formula con i sistemi di massa nominali.

L'algoritmo di ricerca della formula utilizza le impostazioni dei semafori per l'accuratezza della massa. Un errore ppm rosso ottiene un punteggio 0 e una corrispondenza perfetta ottiene un punteggio 100.

Lo spettro MS contribuisce per il 67% al punteggio finale di ricerca della formula e lo spettro MS/MS contribuisce per il 33%. Come risultato, la capacità della formula di prevedere la massa MS ha la massima influenza sul punteggio. Tuttavia, il punteggio è anche influenzato dalla corrispondenza dei frammenti MS/MS.

Il modello isotopico viene utilizzato per generare l'elenco di formule trovate ma non viene utilizzato per generare il punteggio finale. Pertanto, una formula con un modello isotopico errato non viene probabilmente inclusa nell'elenco.

Un elenco delle formule possibili si ottiene utilizzando l'accuratezza della massa dello ione precursore, il modello isotopico e la frammentazione MS/MS. Alle formule proposte viene assegnato un punteggio in base all'accuratezza della massa dello ione precursore e all'accuratezza della massa MS/MS media dei frammenti corrispondenti.

Integrazione

Nell'analisi quantitativa o qualitativa, l'integrazione fa riferimento alla generazione di aree o altezze dei picchi cromatografici per i composti di interesse. Un metodo di trattamento contiene tutte le informazioni necessarie per elaborare i dati.

La compilazione delle informazioni quantitative o qualitative per un determinato gruppo di campioni è detta Results Table. Fare riferimento a [Results Table](#).

Il software ha tre algoritmi di integrazione che possono essere utilizzati:

- **MQ4:** seleziona uno standard a bassa concentrazione (ma non la concentrazione minima) o un campione controllo qualità come campione rappresentativo della routine analitica.
- **AutoPeak:** seleziona uno standard ad alta concentrazione (ma non saturo) o un campione controllo qualità come campione rappresentativo della routine analitica.
- **Summation:** non esegue una ricerca del picco normale, ma presuppone che sia presente un picco vicino al tempo di ritenzione previsto.

Inoltre è possibile integrare manualmente i picchi non considerati dagli algoritmi.

Parametri algoritmo di integrazione AutoPeak

I seguenti parametri vengono utilizzati per identificare e segnalare il picco di interesse.

Per un elenco completo dei parametri disponibili, fare riferimento all'assistenza del sistema.

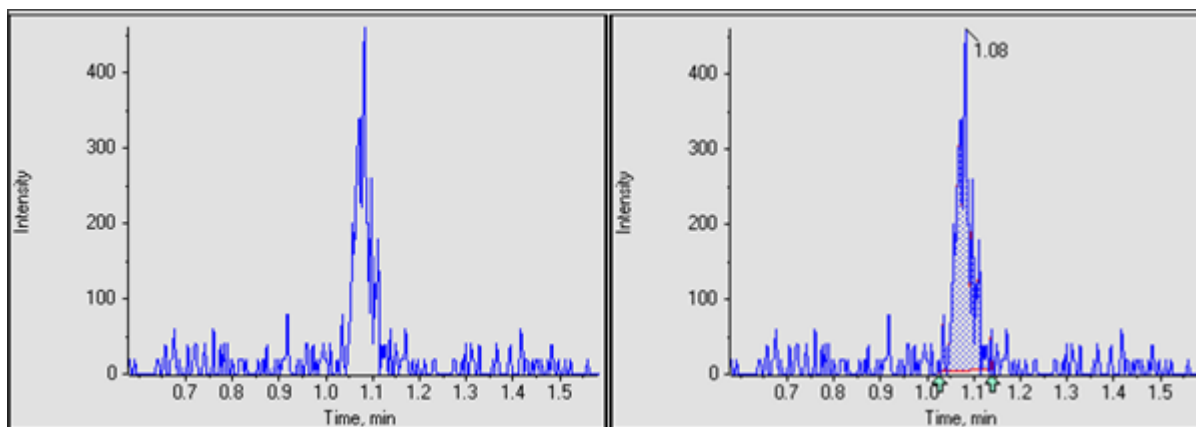
- **Local peak baseline:** il software valuta localmente le modifiche alla linea di base intorno al picco, invece di calcolare la linea di base rispetto all'intero cromatogramma.
- **Linear peak baseline:** il software inserisce una linea tra i punti che si trovano all'inizio e alla fine di quel gruppo specifico di picchi, invece di avere un linea di base non lineare al di sotto il picco.

Saturation correction: quando l'algoritmo rileva che un picco è saturo, utilizza il modello per prevedere come questo picco potrebbe apparire se il rilevatore non svolgesse la funzione di saturazione. In questo modo il profilo si estende sopra la parte superiore del picco per approssimare la risposta che si otterrebbe. Ciò può estendere l'intervallo dinamico lineare delle curve di calibrazione. Questa opzione è disponibile solo durante l'impostazione dei valori generali predefiniti dell'algoritmo e non durante la creazione del metodo di quantificazione o la revisione dei singoli picchi, in quanto non è utile usare questa impostazione solo per alcuni picchi.

Minimum Signal/Noise

Se il segnale/rumore minimo è impostato su sette, come mostrato nel grafico a sinistra nella figura seguente, il picco non viene riportato. Se il segnale/rumore minimo è impostato su due, come mostrato nel grafico a destra, il picco viene riportato. Questo parametro non influisce sull'integrazione.

Figura A-4: Soglia S/N



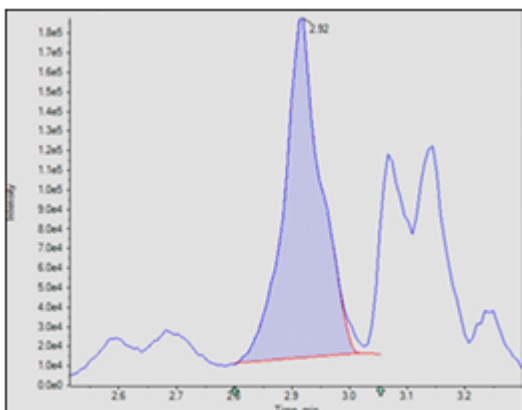
Confidence Threshold

Questo parametro è utilizzato per filtrare potenziali picchi che sono falsi positivi. Il valore predefinito è 50%, che è generalmente adatto. Tuttavia, l'utente potrebbe voler utilizzare un valore maggiore per i dati con un notevole rumore di fondo o per quelli aventi una larghezza di picco che varia notevolmente da campione a campione.

Le due figure seguenti mostrano il modo in cui **Confidence Threshold** influenza il numero di picchi identificati. Se **Confidence Threshold** è impostata a 50%, il picco con una piccola spalla viene identificato come un picco. Se **Confidence Threshold** è abbassata a 16%, l'algoritmo SignalFinder trova due picchi. Trascinare attraverso le regioni dei due picchi per visualizzarli.

Per determinare quali altri picchi sono potenzialmente presenti in questo picco singolo e se la **Confidence Threshold** corretta non è nota, premere **Ctrl** e trascinare attraverso la regione del picco di interesse. In tal modo si abbassa automaticamente la **Confidence Threshold** rivelando il secondo picco di interesse che non è presente quando la **Confidence Threshold** è impostata al 50%.

Figura A-5: Confidence al 50%



Con una confidence al 16%, vengono rilevati due picchi. Trascinare attraverso l'area del picco per identificare i due picchi.

Figura A-6: Confidence 16%

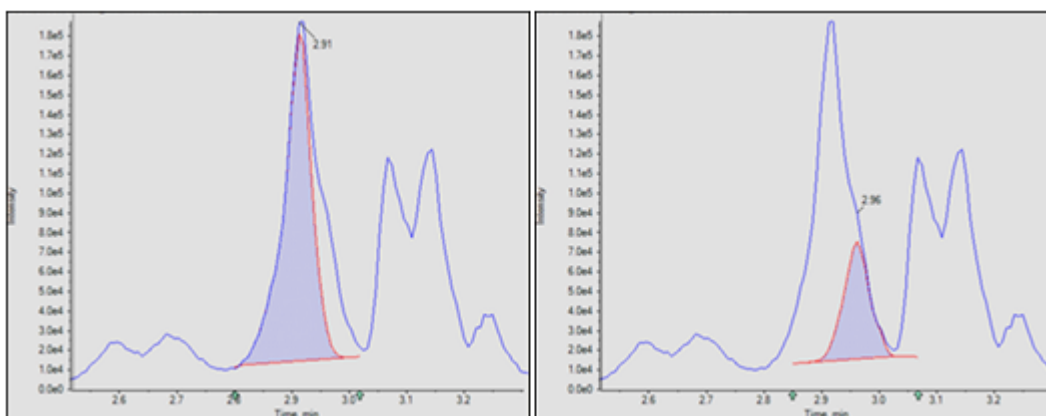
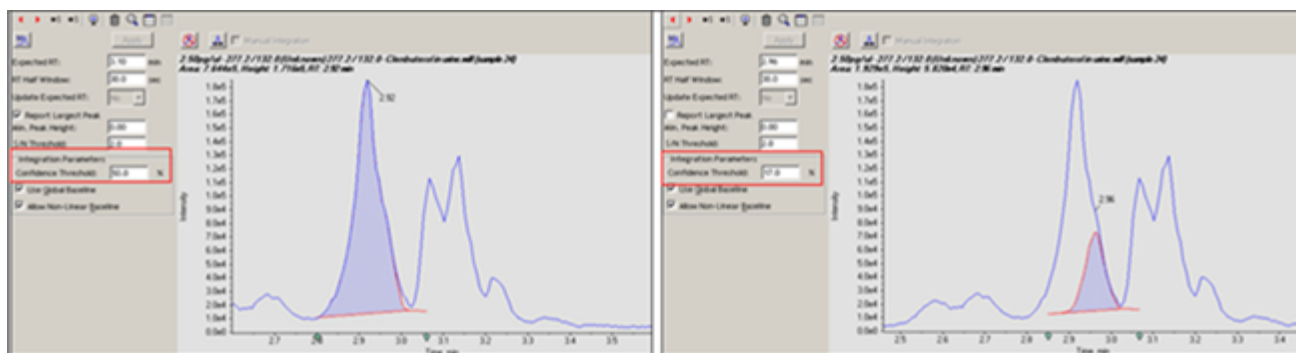


Figura A-7: Parametri di Threshold Parameter

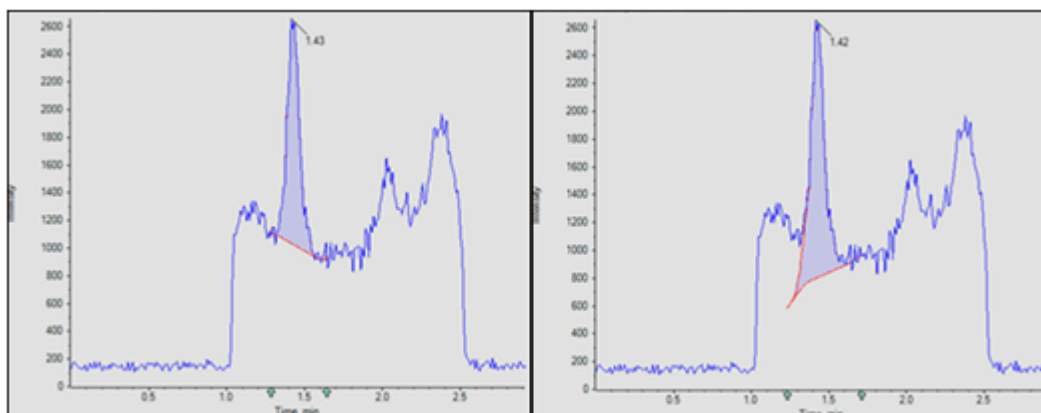


Linee di base del picco locali rispetto a globali

La linea di base del picco può essere locale o globale. Se l'opzione locale è selezionata, il software di quantificazione valuta le modifiche alla linea di base localmente. L'opzione globale utilizza il cromatogramma completo come linea di base.

Per un esempio che mostra quando utilizzare la linea di base locale, fare riferimento alla figura seguente. Il grafico a sinistra mostra un cromatogramma che è stato integrato correttamente utilizzando la linea di base locale. Il grafico a destra mostra lo stesso cromatogramma, integrato in modo non appropriato usando la linea di base globale.

Figura A-8: Utilizzo linea di base globale



Linee di base del picco lineari rispetto a non lineari

La linea di base del picco può essere impostata su lineare o non lineare. L'opzione non lineare stima la linea di base sotto ciascun picco. L'opzione lineare inserisce una linea tra i punti all'inizio e alla fine di quel gruppo specifico di picchi. Per esempi di linee di base lineari e non lineari per i picchi coeluiti, fare riferimento a [Figura A-9](#) e [Figura A-10](#). Gli elementi da 1 a 4 sono picchi convoluti. L'elemento 5 mostra la linea di base, come derivata con opzioni diverse.

La linea di base non lineare è consigliata per picchi multipli. Per il picco singolo, la differenza tra la linea di base lineare e non lineare è irrilevante.

Figura A-9: Esempio di linea di base lineare

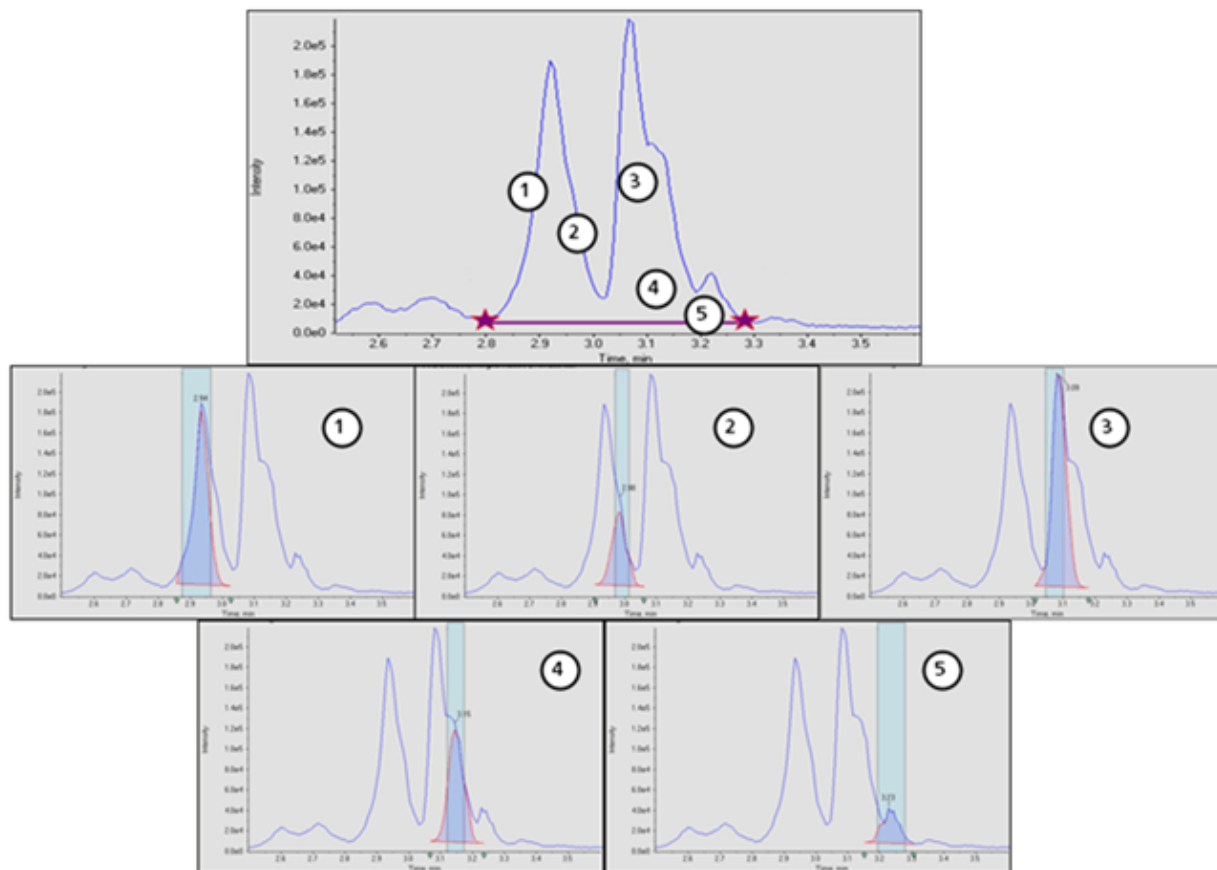
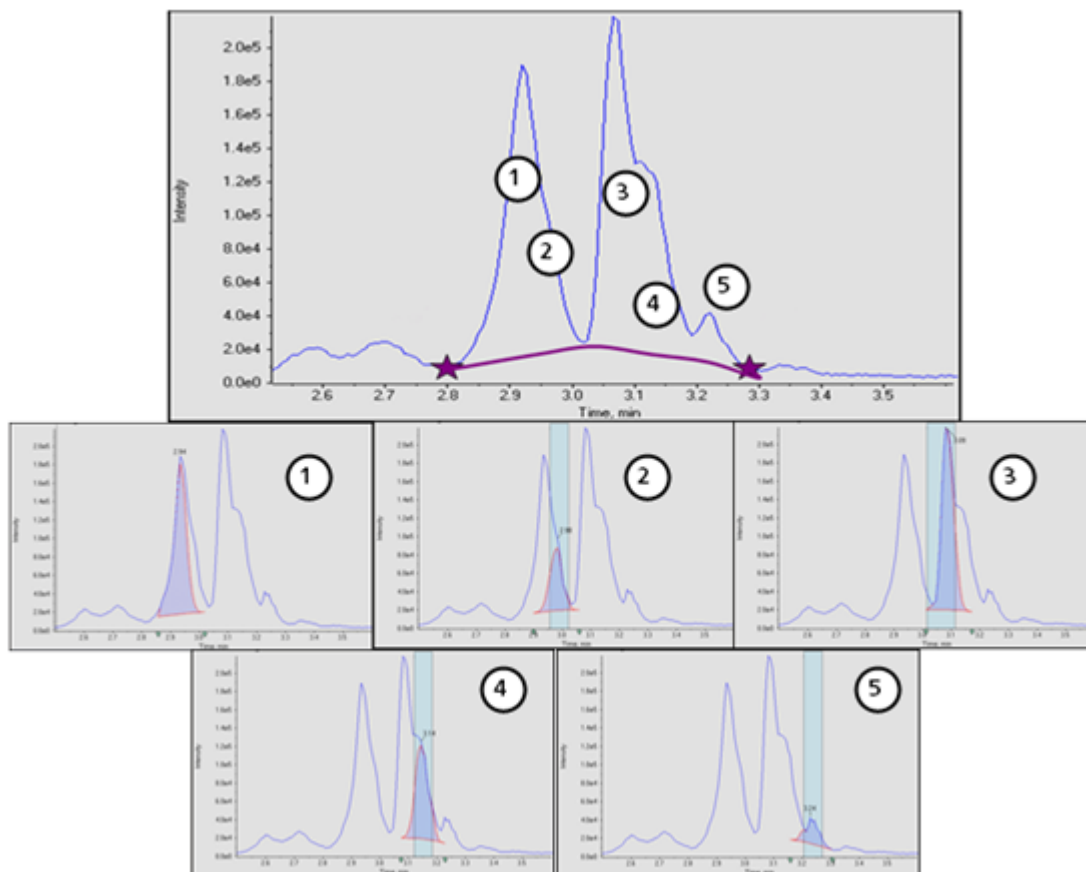


Figura A-10: Esempio di linea di base non lineare



Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4

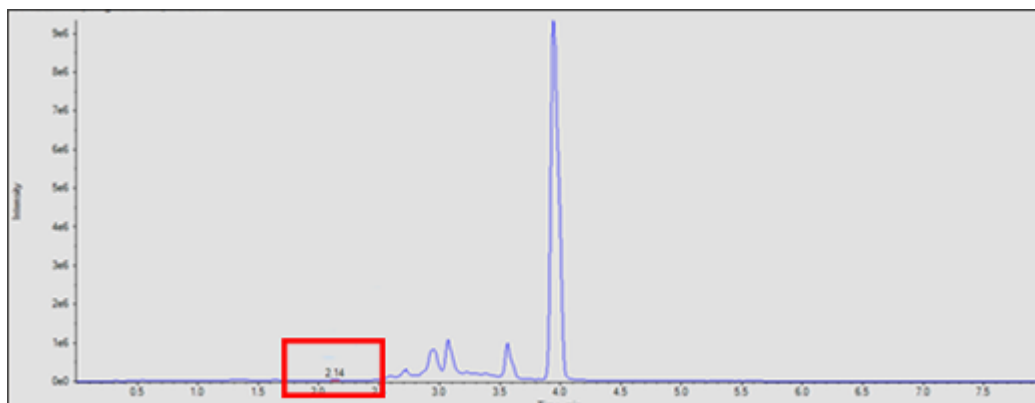
I seguenti parametri vengono utilizzati per identificare e segnalare il picco di interesse. Per un elenco completo dei parametri disponibili, fare riferimento all'assistenza del sistema.

Noise Percentage

Questo parametro è utilizzato per stimare il livello di rumore di fondo nei cromatogrammi. La percentuale specificata dei punti dati con l'intensità più piccola è considerata con rumore di fondo.

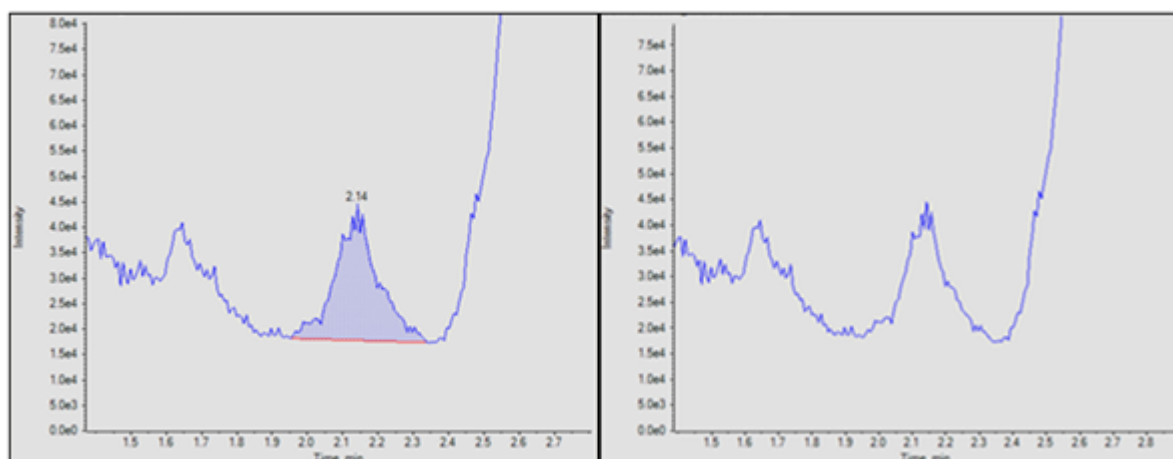
I valori tipici variano dal 20 al 60%. Se non si trovano picchi piccoli in presenza di picchi più grandi, la percentuale di rumore deve essere abbassata. La figura seguente mostra un esempio di picco piccolo in presenza di picco molto grande. Questo picco piccolo non viene trovato quando la percentuale di rumore è impostata a 90%, ma viene trovato quando la percentuale è impostata a 40%.

Figura A-11: Picco di interesse



Nella figura seguente, il grafico a sinistra mostra la percentuale di rumore impostata a 40%. Il grafico a destra mostra l'impostazione a 90%.

Figura A-12: Livelli di rumore



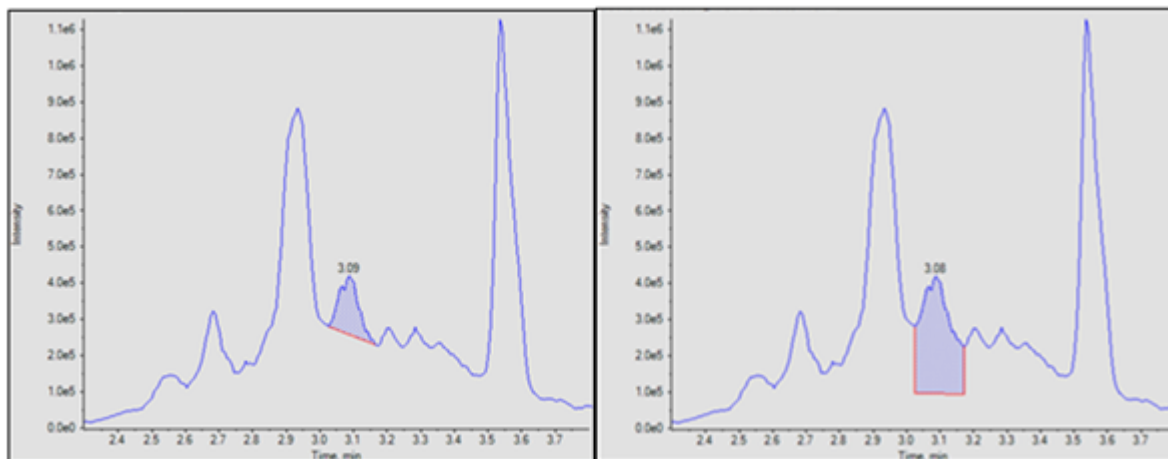
Baseline Subtract Window

Dopo lo smoothing, ma prima di altre elaborazioni, nei cromatogrammi si esegue la sottrazione della linea di base per rimuovere le gobbe nei dati. Per ogni punto dato, la linea di base è calcolata utilizzando i punti dati a sinistra e a destra del punto attuale con l'intensità minima, nella finestra di sottrazione.

Il valore esatto di questo parametro non è critico, a condizione che sia impostato su un valore leggermente maggiore della larghezza di picco prevista.

Nella figura seguente, il grafico a sinistra mostra la finestra di sottrazione della linea di base impostata su 0,1 minuti e il grafico a destra mostra la finestra di sottrazione della linea di base impostata su 1 minuto.

Figura A-13: Finestra di sottrazione della linea di base



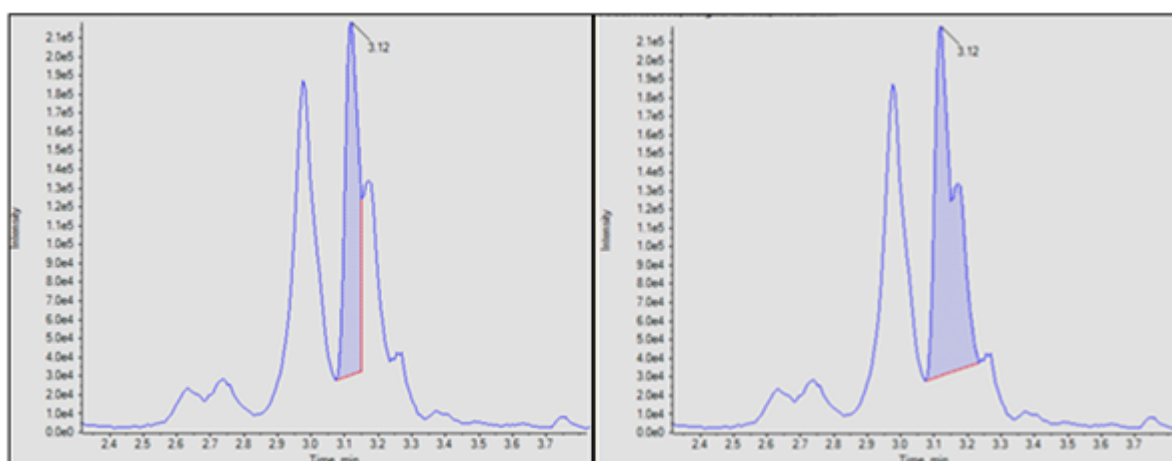
Peak Splitting

Questo parametro controlla se un picco potenzialmente rumoroso è rilevato come picco singolo o come due o più picchi separati. Se il calo tra due picchi potenziali è inferiore al valore specificato, si rileva un picco singolo. In caso contrario, vengono rilevati due picchi.

Impostando questo parametro su un valore elevato, i picchi rumorosi non verranno divisi e rilevati come due picchi separati. Tuttavia, è necessario utilizzare un valore più piccolo se sono presenti due picchi distinti strettamente eluiti (sovrapposti).

Nella figura seguente, il grafico a sinistra mostra la divisione dei picchi impostata su due punti. Il grafico a destra mostra la divisione dei picchi impostata su tre punti.

Figura A-14: Divisione dei picchi



Regressione

L'area o l'altezza dei picchi dell'analita viene tracciata rispetto alle concentrazioni note nella curva di calibrazione o nel metric plot. Dopo di che, viene tracciata una linea sui punti. Questa linea di regressione è usata per calcolare la concentrazione dei campioni sconosciuti.

Equazioni di regressione

Questa sezione descrive le equazioni utilizzate per calcolare le curve di regressione. Nelle seguenti equazioni, x rappresenta la concentrazione dell'analita per i campioni Standard, mentre y rappresenta l'area o l'altezza del picco corrispondente. Le variabili esatte utilizzate per la regressione dipendono dal fatto che si utilizzi uno standard interno e dal fatto che si utilizzi l'area o l'altezza del picco come mostrato nella tabella seguente.

Tabella A-1: Variabili di regressione

Si utilizza uno standard interno?	Si utilizza un'area?	x	y
Sì	Sì	$C_a / C_e / DF$	A_a / A_e
Sì	No	$C_a / C_e / DF$	H_a / H_e
No	Sì	C_a / DF	A_a
No	No	C_a / DF	H_a

dove:

- C_a = effettiva concentrazione analita
- C_e = concentrazione dello standard interno
- DF = fattore di diluizione
- A_a = area picco analita
- A_e = area picco standard interno
- H_a = altezza picco analita
- H_e = altezza picco standard interno

Tipi di ponderazione

La seguente tabella mostra come il fattore di ponderazione (w) è calcolato per ciascuno dei sette tipi di ponderazione.

Tabella A-2: Tipi di ponderazione

Tipo di ponderazione	Peso (w)
Nessuna	Sempre 1,0.
$1/x$	Se $ x < 10^{-5}$, allora $w = 10^5$. Diversamente, $w = 1 / x $.
$1 / x^2$	Se $ x < 10^{-5}$, allora $w = 10^{10}$. Diversamente, $w = 1 / x^2$.
$1/y$	Se $ y < 10^{-8}$, allora $w = 10^8$. Diversamente, $w = 1 / y $.
$1 / y^2$	Se $ y < 10^{-8}$, allora $w = 10^{16}$. Diversamente, $w = 1 / y^2$.

Tabella A-2: Tipi di ponderazione (continua)

Tipo di ponderazione	Peso (w)
ln(x)	Se $x < 0$, allora sarà generato un errore. Se $x < 10^{-5}$, allora $w = \ln 10^5$. Diversamente, $w = \ln(x) $.
ln(y)	Se $y < 0$, allora sarà generato un errore. Se $y < 10^{-8}$, allora $w = \ln 10^8$. Diversamente, $w = \ln(y) $.

Coefficiente di correlazione

Nelle equazioni di regressione, x , y e w sono definiti come in precedenza. Tutte le somme sono calcolate su tutti i campioni standard, a eccezione degli standard contrassegnati come non utilizzati.

Il coefficiente di correlazione è calcolato come:

dove:

$$D_y = \sum w \sum wy^2 - (\sum wy)^2$$

- y_c = valore Y calcolato utilizzando l'equazione appropriata per il tipo di regressione

$$D_{y_c} = \sum w \sum wy_c^2 - (\sum wy_c)^2$$

Tipi di regressione

Nell'area di lavoro Analytics, sono disponibili i tipi di regressione seguenti:

- Mean (solo riquadro Metric Plot)
- Median (solo riquadro Metric Plot)
- Linear ($y = mx + b$)
- Linear through Zero ($y = mx$)
- Mean Response Factor
- Quadratic ($y = a^2 + bx + c$)
- Power
- Wagner
- Hill

Nota: L'opzione **Remove outliers automatically from the calibration curve** nella finestra di dialogo Regression Options nel riquadro Calibration Curve applica automaticamente le regole di rimozione automatica dei valori anomali ai componenti di interesse selezionati. Fare riferimento all'Help.

Linear

L'equazione di calibrazione lineare è:

$$y = mx + b$$

La pendenza e l'intercetta sono calcolate come:

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

dove:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

Linear Through Zero

L'equazione di calibrazione lineare attraverso zero è:

$$y = mx$$

La pendenza è calcolata come:

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

Mean Response Factor

La calibrazione del fattore di risposta medio è:

$$y = mx$$

Si tratta della stessa equazione utilizzata per la calibrazione lineare attraverso lo zero. Tuttavia, la pendenza è calcolata in modo diverso:

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

e la deviazione standard del fattore di risposta è la seguente:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

dove:

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy/x)^2$$

Nota: i punti il cui valore x è zero sono esclusi dalle somme.

Se la linea di punti è caratterizzata da qualche tratto lineare e qualche curvatura, utilizzare la regressione di potenza al posto di quella lineare o quadratica al fine di produrre una linea da qualche parte tra questi adattamenti.

Quadratic

L'equazione di calibrazione quadratica è:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

I coefficienti polinomiali sono calcolati come:

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

dove:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

Power

L'equazione di calibrazione per la funzione di potenza è:

$$y = ax^p$$

Le equazioni per la calibrazione lineare sono utilizzate come precedentemente descritto al fine di calcolare la pendenza (m) e l'intercetta (b), ad eccezione del fatto che il valore x in tali equazioni viene sostituito da ln x e il valore y viene sostituito da ln y. Una volta eseguita tale operazione, i valori a e p vengono calcolati come segue:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Se alcuni valori x o y sono negativi o zero, viene generato un errore.

Wagner

L'equazione di calibrazione di Wagner è:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Le equazioni per la calibrazione quadratica sono utilizzate come precedentemente descritto per calcolare a_0 , a_1 e a_2 , ad eccezione del fatto che il valore x in tali equazioni viene sostituito da $\ln x$ e il valore y viene sostituito da $\ln y$.

Se alcuni valori x o y sono negativi o zero, viene generato un errore.

Hill

L'equazione di calibrazione di Hill è:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

Non è possibile fornire una funzione analitica per la soluzione di a , b , c , n . Al contrario, i coefficienti vengono determinati tramite il metodo iterativo Levenberg-Marquardt.

Rimozione automatica dei valori anomali

Una funzione opzionale consente al software di rimuovere automaticamente i valori anomali dalla curva di calibrazione. Questa funzione consente di risparmiare tempo nelle applicazioni con numerosi composti che hanno gamme e sensibilità differenti.

Quando questa funzione è abilitata, il software esamina tutti i punti di dati in modo iterativo per identificare un intervallo iniziale costituito da quattro punti consecutivi che fornisce la migliore regressione lineare e soddisfa le regole specificate dall'utente per la rimozione dei valori anomali. L'algoritmo calcola regressioni multiple per tutte le permutazioni dei punti di partenza. Considera valide tutte le regressioni che soddisfano le regole specificate dall'utente e le prende tutte attraverso la sequenza di espansione. Per tutti gli intervalli di partenza validi, il successo di ciascuna espansione dipende dal numero totale di punti utilizzati, dall'intervallo dei livelli utilizzati e dal punto con il peggiore errore di precisione assoluto nella regressione prima e dopo l'espansione. La regressione che si estende nell'intervallo più ampio e soddisfa le regole risulta quella "vincente".

Nota: se quattro punti dati non sono disponibili, il software ne utilizzerà tre. L'algoritmo non verrà applicato se sono disponibili meno di tre punti.

Le regole per la rimozione automatica dei valori anomali sono definite nel metodo di trattamento e includono quanto segue:

- Correlazione minima del coefficiente (r)

Nota: Questa opzione utilizza il coefficiente di correlazione, non il coefficiente di determinazione (r^2).

- Errore di precisione massimo consentito per repliche standard al livello di quantificazione inferiore (LLOQ)
 - Errore di precisione massimo consentito per gli standard superiori a LLOQ
-

Principio di funzionamento—Software

- Massimo coefficiente di variazione percentuale (CV) per repliche multiple di uno standard in LLOQ

Nota: Se CV% è maggiore del valore specificato, l'algoritmo rimuove le repliche in ordine decrescente di errore di precisione finché il CV% delle rimanenti repliche è inferiore a questo valore.

- Massimo CV percentuale per più repliche di uno standard a tutti i livelli superiori al LLOQ

Nota: Se CV% è maggiore del valore specificato, l'algoritmo rimuove le repliche in ordine decrescente di errore di precisione finché il CV% delle rimanenti repliche è inferiore a questo valore.

- Se il numero totale specificato di valori anomali include valori anomali al di sotto del limite LLOQ e al di sopra del limite superiore di quantificazione (ULOQ)
- Numero massimo di valori anomali che possono essere rimossi per un livello di concentrazione
- Numero totale di valori anomali che possono essere rimossi da una curva di calibrazione

Nota: Questo algoritmo viene applicato a tutti gli standard, inclusi quelli esclusi manualmente.

Nota: Se il numero di repliche utilizzato per produrre la regressione è diverso per ciascun livello standard, la funzione di rimozione dei valori anomali automatica non funziona perfettamente e deve essere utilizzata solo come punto di partenza. Riesaminare manualmente ciascuna curva di calibrazione.

Suggerimento! Assicurarsi che le soglie di tolleranza per la precisione degli standard nei criteri di accettazione per il metodo di trattamento corrispondano alle soglie della finestra di dialogo Rules for Automatically Removing Outliers for Calibration Standards.

Results Table

Una Results Table è una raccolta delle informazioni quantitative e qualitative associate a un set di campioni. Comprende i calcoli della concentrazione e della precisione che risultano dall'interpolazione della curva di calibrazione standard. Nella Results Table sono inoltre disponibili i risultati della ricerca nella libreria, i risultati della ricerca della formula e altri risultati dell'analisi qualitativa. Possono essere visualizzate area, altezza e altre caratteristiche numeriche. Per una visualizzazione semplificata, nelle Results Table è possibile modificare il numero e il tipo di colonne.

Curve di calibrazione

Una curva di calibrazione, nota anche come curva di concentrazione standard, è un metodo per determinare la concentrazione di una sostanza in un campione sconosciuto confrontando quest'ultimo con un gruppo di campioni standard aventi una concentrazione nota. La curva di calibrazione è il diagramma della risposta (il segnale analitico) dello strumento alle modifiche nella concentrazione dell'analita (la sostanza da misurare). L'operatore prepara una serie

di standard in un range di concentrazioni vicine alla concentrazione prevista dell'analita nel campione sconosciuto.

Gli standard di calibrazione vengono utilizzati per costruire le curve di calibrazione. Letture errate o la mancata lettura di alcuni campioni di calibrazione potrebbero segnalare problemi nella routine analitica. Seguire i metodi accettabili indicati nella letteratura e le direttive dell'agenzia normativa per creare una curva di calibrazione. Esempi di buona pratica nella preparazione delle curve di calibrazione comprendono:

- Preparare gli standard di calibrazione in matrici vuote in cui si dovrà misurare l'analita.
- Generare una curva di calibrazione per ciascun analita da misurare.
- Garantire la copertura del range di concentrazione previsto per l'analita, compresi campioni tipici e atipici.
- Utilizzare sei-otto standard per generare la curva.

Non si tratta di un elenco esaustivo; occorre infatti attenersi ad altre linee guida per determinare la buona pratica nello sviluppo di una curva di calibrazione per il laboratorio.

Nota: in alcune routine analitiche, si utilizzano standard di calibrazione single-point. Le calibrazioni single-point vengono eseguite mediante un campione a matrice vuoto e una singola concentrazione standard. La relazione tra la risposta dello strumento e la concentrazione dell'analita viene determinata mediante la retta creata da questi due punti. I metodi di acquisizione e trattamento devono essere convalidati prima di essere accettati per la finalità d'uso prevista.

Algoritmo segnale-rumore

Durante l'elaborazione dei dati di spettrometria di massa quantitativi, è importante determinare se un determinato picco è significativo oppure no, dove per *significativo* si intende tipicamente *superiore al rumore di fondo*.

Rumore relativo e calcoli segnale-rumore

Generalmente l'altezza del picco viene confrontata con il rumore di fondo misurato in un'area priva di picchi dove il rumore viene generalmente stimato pari a una o tre volte la deviazione standard dei punti dati di questo intervallo. Questo approccio non è ottimale per i seguenti motivi:

- È soggettivo, poiché l'area del rumore viene selezionata manualmente.
- Un'area di fondo senza un picco non può esistere o l'area potrebbe essere troppo stretta per una valutazione accurata del rumore.
- Il rumore nella posizione del picco potrebbe essere abbastanza diverso da quello nell'area di rumore selezionata.
- Anche il fattore "uno o tre" è soggettivo e autorità diverse possono presentare raccomandazioni differenti.
- Il rumore apparente può essere alterato se i dati sono stati pre-elaborati. Ad esempio, sono stati smussati o sottoposti a soglia.

Il concetto di rumore relativo (R_n) consente di sviluppare agevolmente un metodo semplice per calcolare il rumore previsto in un punto qualsiasi dei dati, per eseguire un confronto rispetto al segnale misurato. Si tratta di una metrica efficace e obiettiva che può essere usata per calcolare il rapporto segnale-rumore (S/N) e per valutare e confrontare le prestazioni dello strumento e delle analisi. Esistono diverse applicazioni del concetto di rumore relativo, una delle quali è il calcolo di S/N .

L'algoritmo di base funziona come segue:

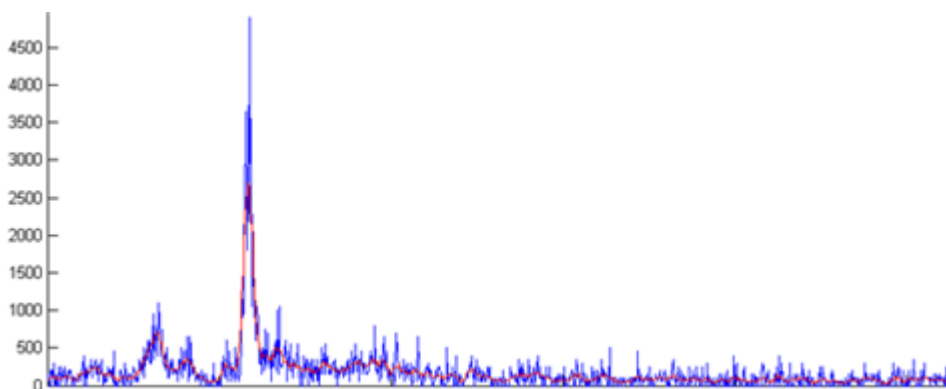
1. Creare un modello di rumore che consenta all'utente di calcolare il rumore previsto in un punto qualunque del record dati, considerando il livello del segnale sottostante in quel punto.

Il modello di rumore può essere determinato tramite considerazioni teoriche oppure può essere modellato sulla base di misurazioni reali di un determinato sistema. Per i rilevatori con conteggio impulsivi, la deviazione standard di un segnale, e quindi il rumore previsto, è proporzionale alla radice quadrata del segnale, pertanto varia con il segnale. In altri sistemi ci sarà un componente di "rumore bianco" costante, eventualmente combinato con un componente dipendente dall'intensità.

2. Valutare il segnale sottostante dal segnale misurato.

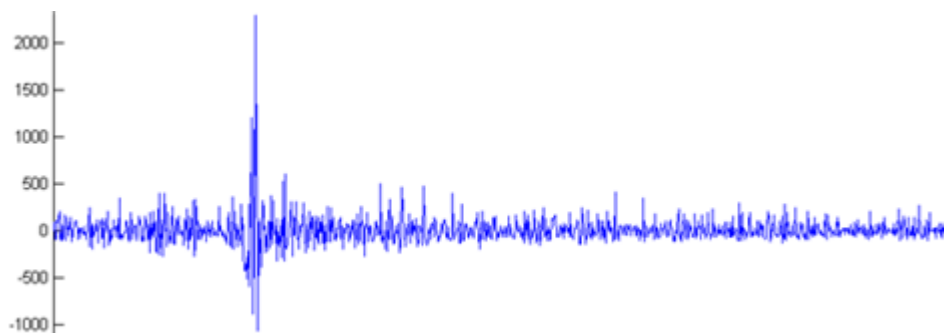
Ciò si può ottenere in diversi modi, tuttavia il più semplice consiste nel generare una versione smussata dei dati. Fare riferimento alla figura: [Figura A-15](#).

Figura A-15: Sovrapposizione di dati grezzi e smussati



3. Misurare il rumore reale lungo i dati usando tutti i punti, sia i picchi che il fondo.

Ciò si ottiene sottraendo la stima del segnale sottostante dal segnale misurato in qualunque punto dei dati in cui il segnale smussato è stato sottratto dall'originale. Il risultato è noto come rumore delta. L'intervallo del rumore delta è ragionevolmente costante, tranne dove vi sono picchi grandi poiché il rumore dipende dal segnale, quindi sarà più grande dove il segnale è maggiore. Fare riferimento alla figura: [Figura A-16](#).

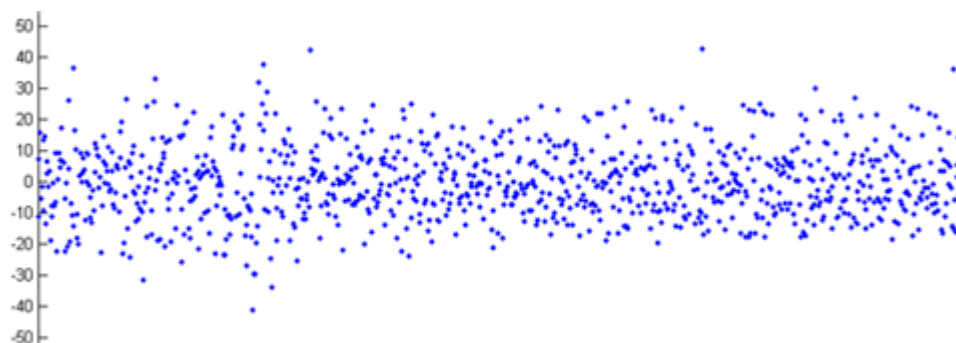
Figura A-16: Grafico dei valori di rumore delta di ogni punto dati

4. In ciascun punto dati, calcolare il rapporto tra il rumore misurato e il rumore previsto.

Ciò significa che, in ogni punto dati dividiamo il rumore misurato nel passaggio 3 per il valore previsto dal nostro modello di rumore, nel nostro caso la radice quadrata dell'intensità. Se il modello di rumore è ottimale, il software genera una serie di valori che rimangono prevalentemente vincolati da alcuni limiti. Fare riferimento alla figura seguente. Questa figura mostra anche il grafico di

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

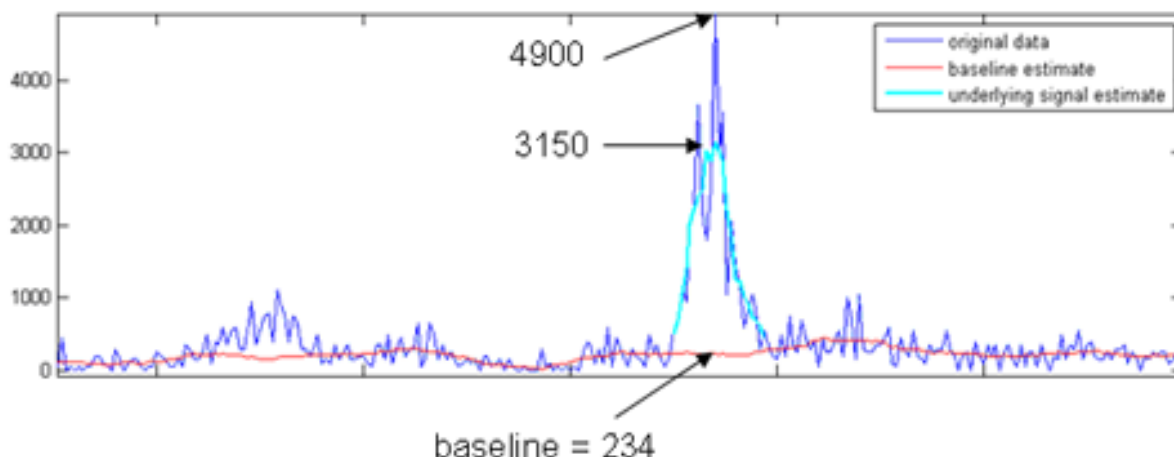
Nota: Questo passaggio riduce la grande variazione nel rumore delta e genera una serie di valori ben vincolati.

Figura A-17: Modello di rumore

5. Calcolare la deviazione standard dei valori del rapporto. Questo è R_n , una stima del rapporto più probabile tra il rumore delta attuale e quello previsto dal modello. Nella figura precedente, il risultato di questa operazione è un valore di 9,5.

La figura seguente mostra un esempio di come è possibile usare il rumore relativo per il calcolo di S/N.

Figura A-18: Sovrapposizione di dati grezzi, stime di segnale sottostante e stime di linea di base



Come descritto in precedenza:

$$\text{noise} = R_n \times \sqrt{(\text{baseline})}$$

In questo esempio:

$$\text{noise} = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Se l'apice del picco viene usato come segnale, S/N è pari 34 (4.900/145) e se viene usata l'altezza del segnale smussato, S/N è pari a 22 (3.150/145).

Quando si crea un rapporto con S/N, l'algoritmo di integrazione MQ4 usa la procedura qui descritta e l'apice del picco come segnale. Poiché l'algoritmo di integrazione AutoPeak adatta un modello al picco, utilizza l'altezza del profilo adattato. Ciò produce un S/N più piccolo. Tuttavia, si tratta di un valore più preciso in quanto è meno influenzato da eventuali picchi di rumore. L'algoritmo di integrazione AutoPeak presenta inoltre un approccio più sofisticato alla stima della linea di base, quindi per questi due motivi i valori S/N riportati dai due algoritmi non sono identici anche se saranno generalmente simili.

Riepilogando, rispetto al solito approccio che prevede la stima del rumore come deviazione standard di un'area di fondo, l'approccio basato sul rumore relativo rispetto al calcolo di S/N presenta i seguenti vantaggi:

- È molto meno soggettivo poiché la regione di fondo non deve essere selezionata manualmente.
- Un valore S/N preciso può essere previsto anche se non esistono aree del cromatogramma prive di picchi.
- Per gli algoritmi di integrazione AutoPeak e Summation, la linea di base, e quindi il rumore, viene stimata nei pressi del picco di interesse. Per l'algoritmo di integrazione MQ4, la linea di base è data dall'intensità del punto dati alla percentuale del rumore specificata dall'utente. Ad esempio, se la percentuale del rumore specificata dall'utente

è pari al 40% e ci sono 100 punti dati, l'algoritmo di integrazione MQ4 ordina i punti dati dall'intensità più bassa alla più alta e utilizza l'intensità del punto dati con la quarta intensità più bassa.

Questo può fare un'enorme differenza per il valore S/N riportato perché l'area di fondo selezionata per l'approccio tradizionale può essere molto più silenziosa rispetto al fondo vicino al picco. Come descritto precedentemente, il valore S/N calcolato usando l'approccio Relative Noise potrebbe fornire valori più piccoli rispetto all'approccio tradizionale. Tuttavia, si tratta di valori più precisi e utili. Fare riferimento a [Figura A-18](#).

Per rendere visibile la colonna **Signal / Noise** nella Results Table, fare riferimento a [Personalizzazione della Results Table](#).

Nota sul valore segnale-rumore quando si utilizza l'algoritmo di integrazione AutoPeak

Poiché l'algoritmo AutoPeak calcola il valore segnale-rumore in modo più preciso (e quindi prevede i valori CV in modo più preciso), se si utilizza l'approccio segnale-rumore 1-sigma, considerare la diminuzione del valore segnale-rumore minimo accettabile su qualunque procedura operativa standard (SOP), sulla base di dati empirici provenienti dal laboratorio.

Segnale-rumore mediante picco-picco

Se viene utilizzato l'algoritmo segnale-rumore, il software calcola il rapporto segnale-rumore considerando la deviazione standard di tutti i punti dati cromatografici tra i tempi di inizio fondo e di fine fondo specificati. Il software calcola il rapporto segnale-rumore per il cromatogramma attivo, sottrae il segnale di fondo medio dal picco selezionato e quindi divide il segnale sottratto per il livello di rumore da picco a picco. Quindi differenzia le regioni di rumore e di picco in base alle massime intensità di ogni regione. Al completamento, il cromatogramma attivo viene etichettato con il rapporto segnale-rumore.

Segnale-rumore mediante deviazione standard

Quando viene utilizzato l'algoritmo segnale-rumore, il software calcola il rapporto segnale-rumore dei picchi cromatografici e li etichetta. Questo algoritmo richiede che vengano selezionate due regioni sul cromatogramma:

- La regione del rumore
- Il picco di interesse

Il software determina quindi quale regione contiene il picco e quale il rumore in base alle intensità massime in ciascuna selezione. Sottrae l'intensità del segnale di fondo media dall'intensità del segnale di picco e quindi divide il segnale sottratto per un fattore specificato dall'utente moltiplicato per la deviazione standard della regione del rumore.

Definizione di aree del rumore

Utilizzare questa procedura per definire aree del rumore se si utilizza la deviazione standard o l'algoritmo picco-a-picco.

Principio di funzionamento—Software

Nota: È possibile utilizzare un solo algoritmo segnale-rumore in una Results Table. Per applicare un algoritmo segnale-rumore diverso ai dati, modificare le impostazioni predefinite del progetto, quindi creare una nuova Results Table.

1. Nelle impostazioni predefinite del progetto, selezionare l'algoritmo segnale-rumore **Standard Deviation** o **Peak-to-Peak**.

Suggerimento! Per aprire le impostazioni predefinite del progetto, fare clic su **Projects > Project default settings**.

2. Creare un metodo di elaborazione.
3. Nella pagina Integration, fare clic su **Options > Show Noise Regions**.
4. (Se necessario) Utilizzare il mouse per modificare l'area del rumore.

Nota: È necessario impostare l'area del rumore per ogni transizione.

5. Elaborare i dati.
6. Nel riquadro Peak Review fare clic su **Options > Show Noise Regions**.
7. (Se necessario) Utilizzare il mouse per modificare l'area del rumore.

Colonne calcolate

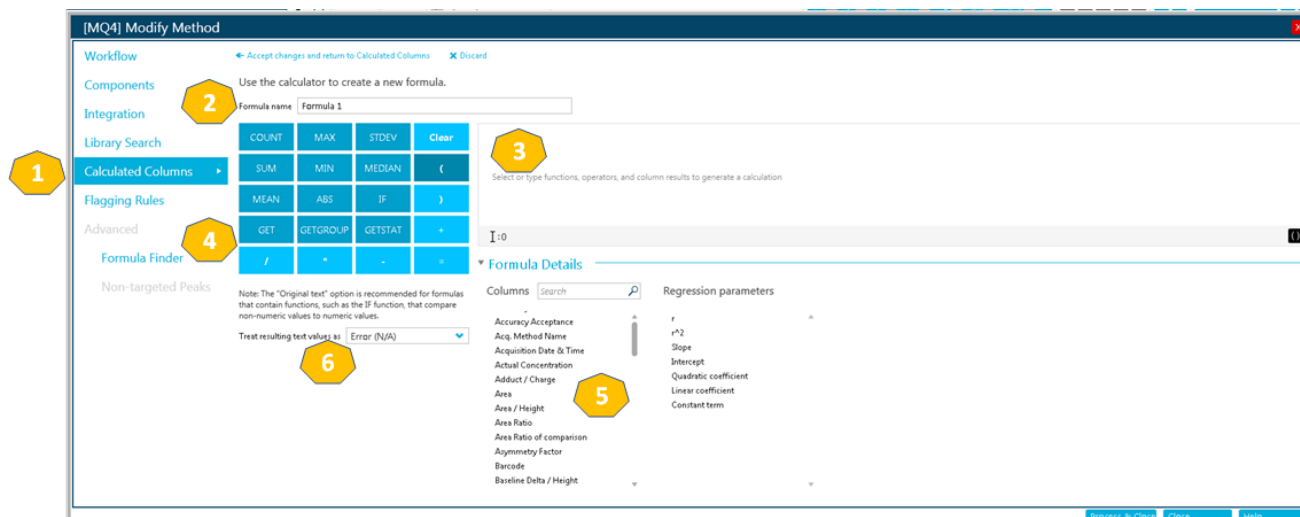
Le colonne calcolate sono formule che comportano l'aggiunta di nuove colonne calcolate a una Results Table. Dopo la creazione di una formula e l'elaborazione (o la rielaborazione) dei dati, i risultati della formula vengono mostrati in una nuova colonna personalizzata.

Come orientarsi nell'interfaccia utente Calculated Column

Le colonne calcolate vengono create in un metodo di elaborazione. Possono essere importate ed esportate come file `frm1` per la condivisione o un utilizzo futuro.

Nella figura seguente viene mostrata l'interfaccia dell'editor della formula.

Figura A-19: Interfaccia utente Calculated Columns



Elemento	Descrizione
1	Passaggio Calculated Columns nel flusso di lavoro del metodo di elaborazione. Fare clic per aprire la pagina Calculated Columns. Fare clic su Add Formula (non mostrato).
2	Il campo Formula name . Digitare un nome per la formula. Nota: Il nome della formula non può contenere i nomi delle funzioni sul calcolatore, parentesi quadre o rotonde.
3	Il campo Formula .
4	Un calcolatore contenente operatori e funzioni di uso comune. Nel campo della formula è possibile digitare operatori aggiuntivi: <ul style="list-style-type: none"> • > (maggiore di) • >= (maggiore o uguale a) • < (minore di) • <= (minore o uguale a) • != (non uguale a) Per ulteriori informazioni su questi operatori e funzioni, fare riferimento alla <i>Guida online</i> .
5	Colonne della Results Table e parametri di regressione disponibili. Nota: Questo elenco non è disponibile nelle tabelle <code>qsession</code> .

Elemento	Descrizione
6	<p>Il menu Treat resulting text values as consente all'utente di configurare il modo in cui vengono gestite le immissioni di testo. Questa opzione è importante nelle colonne della Results Table che possono contenere output numeri e di testo.</p> <p>Ad esempio, le colonne di concentrazione calcolate possono contenere valori numerici e valori non numerici come N/A, degenerate e infinity.</p>

Nota: Quando un utente inizia a digitare una formula che utilizza una serie di campioni, diventa disponibile un elemento di selezione campione.

Estrazione semplice di informazioni non predefinite

La funzionalità *calculated columns* consente agli utenti di mostrare le informazioni non disponibili per impostazione predefinita nelle Results Table.

Ad esempio, per mostrare R^2 come colonna nella Results Table, l'utente può creare una formula uguale a R^2 .

Figura A-20: Creazione di una colonna personalizzata con Calculated Columns

← 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 <input type="text" value="Search"/>	Regression parameters
<ul style="list-style-type: none"> Accuracy Accuracy Acceptance Acq. Method Name Acquisition Date & Time Actual Concentration 	<ul style="list-style-type: none"> r r^2 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

Formule aritmetiche semplici

È possibile creare formule semplici per eseguire operazioni matematiche di base.

Esempio: R²

```
[r] * [r]
```

In questo esempio, il valore R² viene riprodotto usando l'operatore di moltiplicazione (*) per moltiplicare il valore R per se stesso.

Esempio: punti raccolti al secondo

```
[Points Across Baseline]/((([End Time]-[Start Time])*60)
```

In questo esempio, i punti sulla linea di base vengono divisi per i secondi dall'inizio alla fine di un picco cromatografico integrato. Questa formula utilizza gli operatori di divisione (/), moltiplicazione (*) e sottrazione (-).

Funzioni più complesse

Esistono molte altre funzioni e strutture di controllo. Tra le più comuni ci sono **MEAN()**, **MAX()** e **MIN()** che vengono mostrate nel calcolatore sotto la barra della formula.

Per un elenco completo dei dettagli della sintassi, degli operatori e delle funzioni, fare riferimento alla *Guida online*.

Esempio: MEAN([Area]) per Standards

Quando si utilizza una funzione che opera su tutti i valori, l'utente può selezionare i campioni da includere nel calcolo.

Figura A-21: Come ottenere la media dell'area di picco dei soli campioni standard

← 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	+
/	*	-	=

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:

MEAN([Area])

I:12

▼ Formula Details

Columns

- 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

Regression parameters

- r
- r²
- Slope
- Intercept
- Quadratic coefficient
- Linear coefficient
- Constant term

MEAN value will be calculated using the following sample types:

- 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...

Esempio: combinazione di funzioni

È possibile combinare funzioni aritmetiche semplici e funzioni più complesse. Ad esempio, per calcolare i punti mediani al secondo raccolti, utilizzare la seguente formula:

```
MEAN([Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60))
```

Istruzioni IF

La funzione **IF** esegue un test logico e restituisce un valore per un risultato true e un altro per un risultato false. Le funzioni **IF** annidate possono essere utilizzate per testare più di una condizione. La funzione **IF** può essere combinata con altre funzioni logiche come **and** e **or** per estendere un test logico.

Nota: "&&" e "||" possono essere usati rispettivamente per **and** e **or**. Gli operatori **and** e **or** devono essere delimitati da spazi al contrario degli operatori && e ||.

La sintassi dell'istruzione **IF** di base è la seguente:

```
if(<condition>;<value if true>;<value if false>)
```

- *<condizione>* è un valore o un'espressione logica che può essere valutata come true o false.
- *<valore if true>* è un valore da restituire e mostrare nella colonna Results Table corrispondente quando *<condizione>* Restituisce true.
- *<valore if false>* è un valore da restituire e mostrare nella colonna Results Table corrispondente quando *<condizione>* restituisce false.

Nota: Il simbolo della funzione **IF** può essere selezionato dal calcolatore, digitato o copiato da un'altra origine. Può essere utilizzato nella sintassi **if** o **IF**.

La funzione **IF** consente altre funzioni numeriche, ad esempio **MEAN**, **STDEV** e così via, da utilizzare anche nella formula, nelle espressioni *<condizione>*, *<valore if true>* o *<valore if false>* .

Esempio: *<condizione>*

Alcuni esempi di una *<condizione>* includono:

```
[Peak Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

```
[Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2
```

Esempio: <valore if true> e <valore if false>

<valore if true> e <valore if false> possono essere numeriche o di testo.

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT window'; 'not applicable')
```

Esempio: valore medio per area standard interna

In questo esempio, il valore medio dell'area standard interna (IS) viene calcolato sui campioni desiderati e confrontato a un valore 1e6. Il valore dell'area IS media viene mostrato nella colonna Results Table corrispondente se **MEAN ([IS Area])** è maggiore di 1e6, ovvero se <condizione> è true. Se **MEAN ([IS Area])** è minore di 1e6, ovvero se la <condizione> è false, la colonna Results Table contiene **Review IS performance**, il <valore if false>.

```
IF(MEAN([IS Area])>=1e6;'MEAN([IS Area]');'Review IS performance')
```

Nota: Solo le funzioni **IF** possono contenere più calcoli.

Treat Resulting Text Values As

L'opzione **Treat resulting text values as** determina il modo in cui il testo viene interpretato in una colonna personalizzata della Results Table che contiene testo o una combinazione di numeri e testo. Ad esempio, la colonna **Sample Type** contiene solo testo, la colonna **Precursor Mass** contiene solo valori numerici e la colonna **Calculated Concentration** potrebbe contenere sia valori numerici sia valori di testo.

A seconda delle funzioni usate in una formula, l'opzione **Treat resulting text values as** consente l'interpretazione specifica dei valori di testo nella colonna su cui è basato il calcolo. Le opzioni disponibili includono:

- **Zero**
- **Ignore (blank)**
- **Error (N/A)**
- **Original text**

Nota: Per ulteriori informazioni su queste opzioni, fare riferimento alla *Guida online*.

Se i calcoli sono basati sulle funzioni **COUNT, MAX, STDEV, SUM, MIN, MEDIAN, GET, GETGROUP, SLOPE, INTERCEPT, MAD** o **GETSTAT**, le opzioni consigliate sono **Zero, Ignore (blank)** o **Error (N/A)**. Queste opzioni sono anche consigliate nelle istruzioni **IF** quando la formula contiene colonne che dovrebbero contenere valori numerici.

Original text è l'opzione consigliata nelle istruzioni **IF** in cui i componenti delle espressioni <condizione>, <valore if true> e <valore if false> Potrebbero essere sia numerici sia di testo, specialmente quando si utilizzano funzioni aggiuntive.

Principio di funzionamento—Software

Nota: Nelle istruzioni **IF** con più di una <condizione>, la mancata valutazione anche di una <condizione> restituiscono <valore if false> nella colonna personalizzata della results table.

Esempio

In questo esempio, le colonne utilizzate nella formula potrebbero contenere sia valori di testo sia valori numerici. Pertanto, è consigliata l'opzione **Original text**.

```
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'))
```

Questa formula **IF** contiene le colonne **Sample Type** e **Calculated Concentration**. I valori nella colonna **Sample Type** devono essere trattati come **Original text**. Per la colonna **Calculated Concentration**, potrebbe essere necessario trattare i valori non numerici quali <0 e **Degenerate** come **Zero**.

Poiché i valori non numerici devono essere trattati in modo diverso, è consigliabile dividere la formula in più formule più piccole, per un miglior controllo dei valori non numerici.

Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto

B

Se la chiusura a contatto è configurata sul sistema, può essere utilizzata per calibrare il sistema sia in modalità lotto sia manuale:

- Modalità lotto: il sistema può essere calibrato con il metodo CDS o LC. Fare riferimento a [Calibrazione del sistema in modalità lotto](#).
- Modalità manuale: il sistema può essere calibrato con il metodo CDS o LC. Avviare il metodo facendo clic su **Start** o su **Start with LC** nell'area di lavoro MS Method. Quando lo stato cambia in **Load**, avviare l'iniezione sul LC dispositivo.

Nota: l'area di lavoro MS Tune non supporta la funzione chiusura a contatto. MS Tune non attende il segnale di chiusura a contatto.

Calibrazione del sistema in modalità lotto

Utilizzare un sistema CDS o un metodo LC per calibrare il sistema.

Calibrazione del sistema usando il CDS

Se il sistema è in comunicazione con un dispositivo esterno mediante chiusura a contatto, seguire queste linee guida per calibrare il sistema con il CDS:

- Configurare le proprietà di autocalibrazione, incluso il numero di campioni tra le calibrazioni.
- Sincronizzare i metodi sul sistema LC e lo spettrometro di massa per consentire il tempo necessario per la calibrazione tra campioni. Le seguenti sezioni descrivono due diverse opzioni per eseguire questa operazione.
- Dopo aver inviato il lotto, attendere il completamento della calibrazione iniziale, quindi, quando il sistema entra nello stato di caricamento, avviare l'iniezione sul dispositivo esterno.

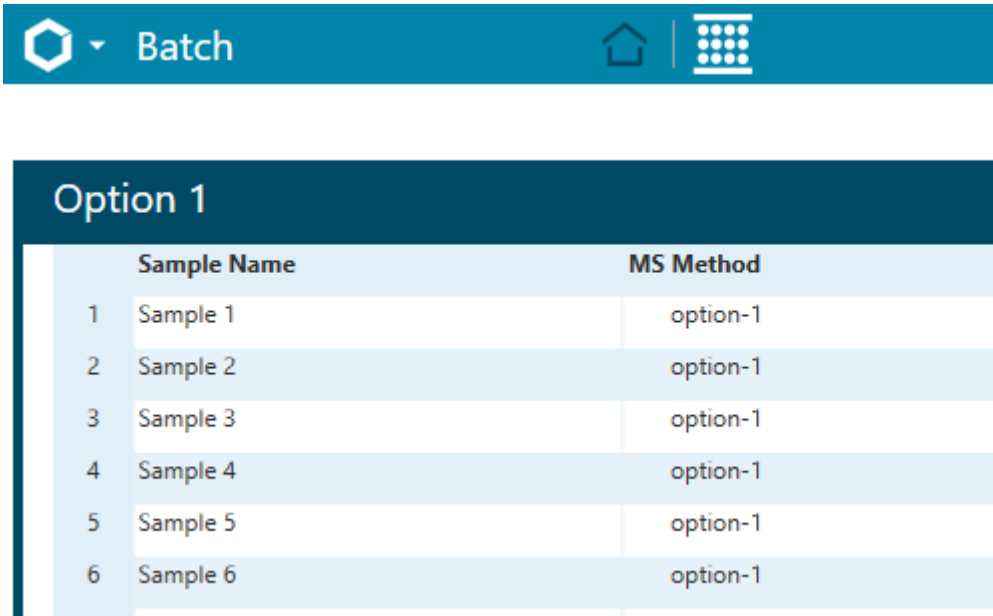
Opzione 1

Per sincronizzare il sistema LC e lo spettrometro di massa, accertarsi che i metodi LC siano almeno due minuti più lunghi rispetto ai metodi dello spettrometro di massa.

Gli esempi che seguono mostrano il lotto e la coda nel software SCIEX OS e la pianificazione corrispondente sul dispositivo esterno per un lotto in cui viene eseguita la calibrazione dopo ogni terzo campione.

Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto

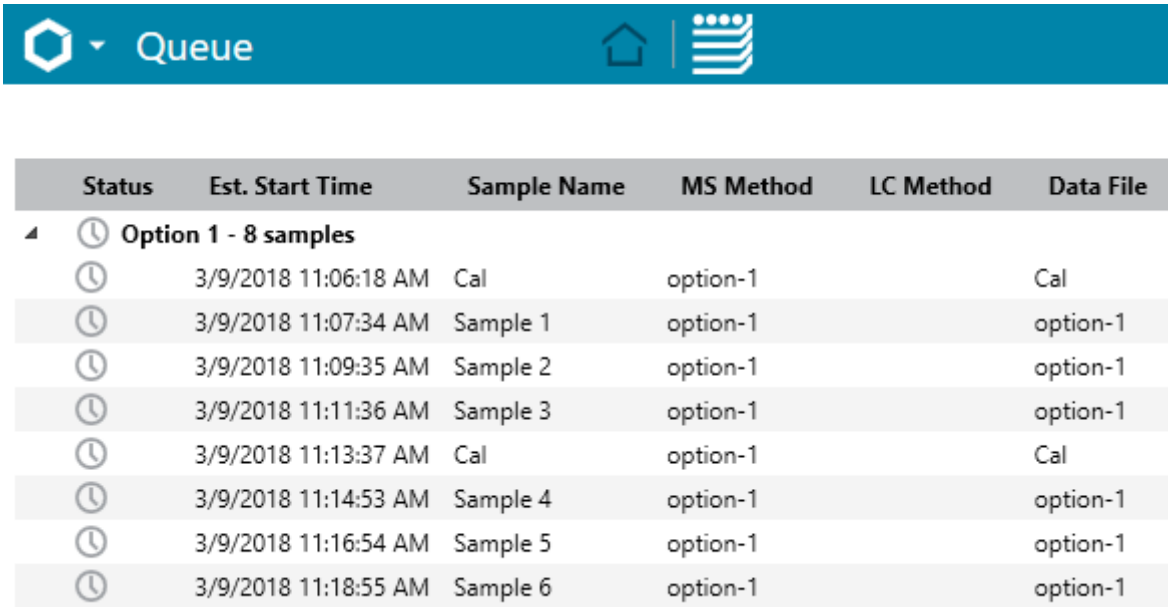
Figura B-1: Calibrazione CDS: esempio di lotto



The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing a home icon, a dropdown menu with 'Batch', and a grid icon. Below the header, a dark blue bar displays 'Option 1'. A table with a light blue background lists six samples, each with an ID, a name, and an MS Method.

	Sample Name	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

Figura B-2: Calibrazione CDS: esempio di coda



The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing a home icon, a dropdown menu with 'Queue', and a list icon. Below the header, a table with a grey header and light grey rows displays the status and timing of a sequence of samples.

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

Tabella B-1: Sequenza di campionamento sul dispositivo esterno

Durata (mm:ss)	Iniezione
00:00	Campione 1
12:00	Campione 2
24:00	Campione 3
36:00	Campione 4

Tabella B-1: Sequenza di campionamento sul dispositivo esterno (continua)

Durata (mm:ss)	Iniezione
48:00	Campione 5
60:00	Campione 6

Opzione 2

Questa opzione è adatta per un flusso di lavoro con un metodo LC breve.

Seguire queste linee guida per sincronizzare il sistema LC e lo spettrometro di massa:

- Per tutte le calibrazioni tranne la prima nel lotto, configurare il dispositivo esterno per l'iniezione di un campione vuoto ogni volta che si pianifica la calibrazione. Ad esempio, se vengono acquisiti tre campioni tra le calibrazioni, assicurarsi che ogni quarta iniezione sia un campione vuoto.
- Assicurarsi che il tempo di esecuzione del campione vuoto sul dispositivo esterno sia di 2 minuti o superiore (la calibrazione del CDS impiega 2 minuti). Assicurarsi che la durata del metodo sia inferiore o uguale al tempo tra le iniezioni.

Gli esempi che seguono mostrano il lotto e la coda nel software SCIEX OS e la pianificazione corrispondente sul dispositivo esterno per un lotto in cui viene eseguita la calibrazione dopo ogni terzo campione.

Figura B-3: Calibrazione CDS: esempio di lotto

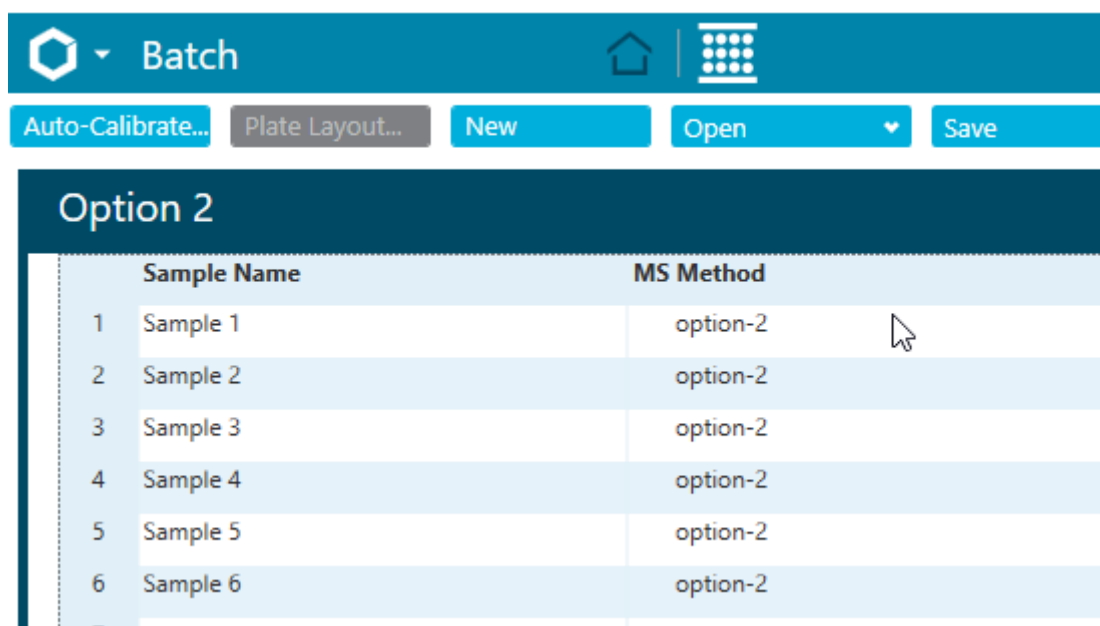



Figura B-4: Calibrazione CDS: esempio di coda



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 2 - 8 samples				
⌚	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

Tabella B-2: Sequenza di campionamento sul dispositivo esterno

Durata (mm:ss)	Iniezione
00:00	Campione 1
02:00	Campione 2
04:00	Campione 3
06:00	Vuoto
08:00	Campione 4
10:00	Campione 5
12:00	Campione 6

Calibrazione del sistema con il sistema LC

Se il sistema è in comunicazione con un dispositivo esterno mediante chiusura a contatto, seguire queste linee guida per calibrare il sistema utilizzando il dispositivo esterno:

- Nelle proprietà per lo spettrometro di massa, configurare una valvola per simulare il dispositivo esterno.
- Creare un metodo LC per la valvola.
- Accertarsi che la durata del metodo sia inferiore o uguale al tempo tra le iniezioni sul dispositivo esterno.
- Configurare le proprietà di autocalibrazione per il lotto: selezionare la tabella di riferimento degli ioni e impostare la frequenza di calibrazione. Per **Calibrant delivery**, selezionare il metodo LC per la valvola, mentre per **MS method**, selezionare il metodo MS da utilizzare.

Figura B-5: Calibrazione LC: Automatic Calibration Editor

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

Nota: assicurarsi di inserire un tempo di ritenzione per ciascun peptide nella tabella di riferimento.

- Inviare il lotto e avviare la coda. Assicurarsi che le voci presenti nella coda corrispondono alle voci della pianificazione sul dispositivo esterno.
- Avviare l'iniezione sul dispositivo esterno.

Gli esempi che seguono mostrano il lotto e la coda nel software SCIEX OS e la pianificazione corrispondente sul dispositivo esterno per un lotto in cui viene eseguita la calibrazione dopo ogni terzo campione. La durata del metodo MS è di 1 minuto. Anche la durata del metodo di calibrazione è pari a 1 minuto.

Calibrare un sistema configurato con chiusura a contatto

Figura B-6: Calibrazione LC: lotto

	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		

Figura B-7: Calibrazione LC: coda

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	

Tabella B-3: Sequenza di campionamento sul dispositivo esterno

Durata (mm:ss)	Iniezione
00:00	Calibrante
01:00	Campione 1
02:00	Campione 2

Tabella B-3: Sequenza di campionamento sul dispositivo esterno (continua)

Durata (mm:ss)	Iniezione
03:00	Campione 3
04:00	Calibrante
05:00	Campione 1
06:00	Campione 2
07:00	Campione 3

Calibrazione in modalità manuale

Questa sezione descrive come utilizzare la chiusura a contatto per calibrare il sistema quando si esegue un metodo manualmente nell'area di lavoro MS Method.

Calibrazione del sistema con il CDS

1. Nell'area di lavoro MS Method, aprire il metodo da eseguire.
2. Fare clic su **Advanced > Calibrate**.
3. Nel campo **Ion Reference Table**, selezionare **X500 Positive Calibration Solution** o **X500 Negative Calibration Solution**, a seconda della polarità del metodo.
4. Selezionare **Apply Calibration**.
5. Fare clic su **OK**.
6. Fare clic su **Start**.

Calibrazione del sistema con il metodo LC

Se il sistema è in comunicazione con un dispositivo esterno mediante chiusura a contatto, seguire queste linee guida per calibrare il sistema utilizzando il dispositivo esterno:

- Nelle proprietà per lo spettrometro di massa, configurare una valvola per simulare il dispositivo esterno.
 - Creare un metodo LC che contenga una valvola e abbia una durata inferiore o uguale alla durata del metodo MS.
1. Nell'area di lavoro MS Method, aprire il metodo MS da eseguire.
 2. Fare clic su **Start with LC** e selezionare il metodo LC.
 3. Quando lo stato cambia in **Loading**, avviare l'iniezione sul dispositivo LC.

Masse esatte e formule chimiche

C

Reserpina

Tabella C-1: Masse esatte reserpina (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Descrizione	Massa
Ione molecolare C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Frammento C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448,19659
Frammento C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397,21218
Frammento C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365,18597
Frammento C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236,12812
Frammento C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195,06519
Frammento C ₁₁ H ₁₂ NO	174,09134

Peptide ALILTLVS

Tabella C-2: Massa esatta peptide ALILTLVS

Nome	Sequenza	Massa	Stato di carica
Ione precursore	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+
Frammento interno y b	IL o LI	227,1754	1+
Frammento interno y b	LT o TL	215,139	1+
b2	AL	185,1285	1+

Tabella C-2: Massa esatta peptide ALILTLVS (continua)

Nome	Sequenza	Massa	Stato di carica
a2	AL	157,1335	1+
Ioni immonio	I o L	86,09643	1+

Introduzione

Questo documento fornisce una panoramica delle esercitazioni relative ad alcuni degli strumenti e delle funzionalità disponibili nel software. Ciò non fornisce una descrizione dettagliata di ogni operazione disponibile, ma spiega alcuni dei più comuni flussi di lavoro che il software può seguire.

Organizzazione

Mentre alcune funzioni e operazioni sono specifiche per alcuni flussi di lavoro e applicazioni, per la maggior parte sono generiche e sono utilizzate frequentemente quando si esplorano dati qualitativi. Questa sezione del documento fornisce una breve introduzione ai concetti del software e una descrizione di alcune delle operazioni più comuni ed essenziali. Le sezioni successive descrivono approcci a specifici flussi di lavoro e utilizzano i file di dati campione forniti con il software.

I file campione sono disponibili all'indirizzo sciex.com/software-support/software-downloads, in **SCIEX OS resources**. Copiare l'intero progetto nella cartella `D:\SCIEX OS DATA` sul computer. Negli esempi di questa esercitazione vengono usati i seguenti file campione:

- 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

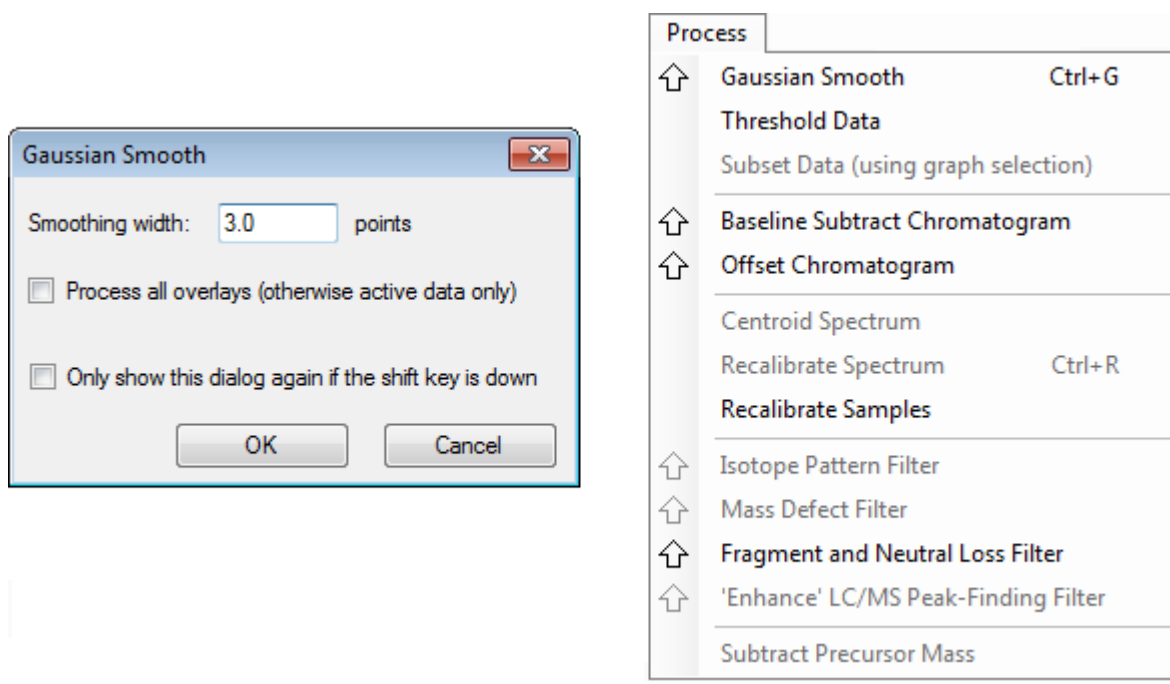
I file Bromocriptine provengono da analisi IDA in modalità negativa di un'incubazione con microsomi di fegato di ratto. Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff è stato ottenuto dal punto temporale di un'ora, mentre gli altri due sono per i punti temporali zero e un'ora addizionati nel plasma. Il file Bromocriptine.mol contiene la struttura molecolare per Bromocriptina. Da DataSET61 a DataSET66 sono file raccolti da Loratadina e dalle sue impurità. I diversi set di dati rappresentano diversi livelli di concentrazione. Il file RP_Intact.wiff deriva dall'analisi

della mioglobina intatta. Il file RP_digests.wiff deriva dall'analisi di mioglobina digerita tripticamente.

Opzioni

Il software fornisce molte opzioni per regolare in maniera fine il funzionamento dei comandi. Alcuni, come mostrato in [Figura D-1](#), forniscono una casella di controllo che consente di visualizzare la finestra di dialogo solo se si preme il tasto **Maiusc**. Si elimina, così, la necessità di interagire con la finestra di dialogo se non sono necessarie modifiche ai parametri. Il menu per questi comandi contiene una freccia con la punta in alto.

Figura D-1: Opzioni



Riquadri

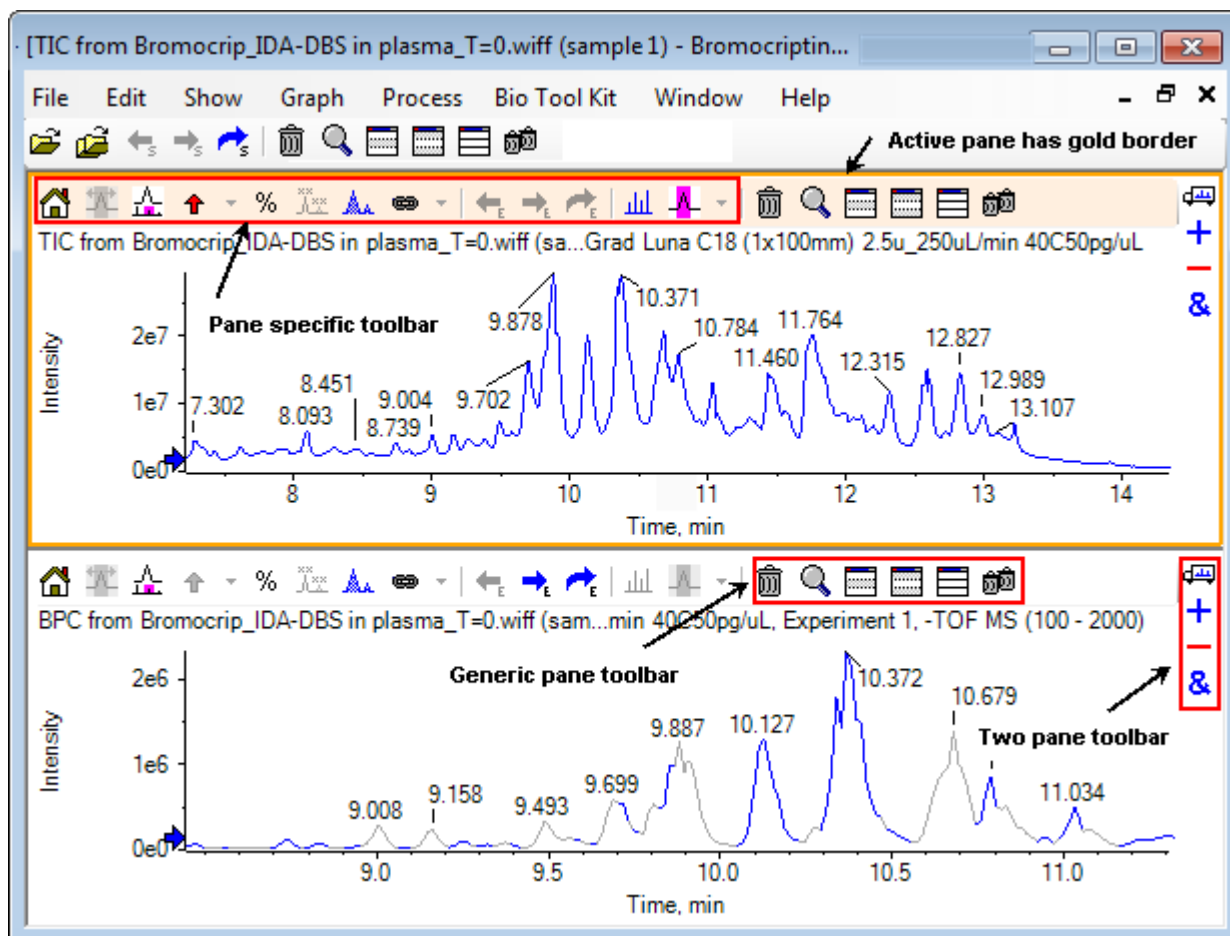
Mentre il software utilizza le finestre per mostrare e ricevere informazioni, il componente dell'interfaccia utente di base è un riquadro. Una finestra può contenere uno o più riquadri, ma può essere attivato solo un riquadro alla volta. I riquadri ricevono i comandi dai menu e dalle barre degli strumenti. I menu e le barre degli strumenti forniscono i modi per manipolare i riquadri o i dati contenuti in essi.

I riquadri possono contenere dei grafici come spettri e cromatogrammi, mappe termiche o tabelle, così come viste più specializzate. Le tipiche operazioni di elaborazione creano dei riquadri per visualizzare le informazioni o per lavorare sui dati riportati all'interno di un riquadro. Ogni riquadro contiene strumenti generici a singolo e doppio riquadro. La maggior parte dei riquadri sono strumenti aggiuntivi che sono specifici per il tipo di riquadro. Gli strumenti aggiuntivi consentono di accedere ai comandi più comuni.

Esercitazione per Explorer

Un esempio di una finestra comune è mostrato nella [Figura D-2](#). La finestra contiene due riquadri, con il riquadro attivo, il cromatogramma, identificato dal bordo colorato e la barra degli strumenti.

Figura D-2: Esempio di riquadri all'interno di una finestra



Le operazioni comuni del riquadro sono riassunte in [Barra degli strumenti del riquadro generico](#) e in [Barra degli strumenti a due riquadri](#). Le operazioni specifiche del riquadro sono riassunte in [Grafici](#).

Barra degli strumenti del riquadro generico

Fare clic su un'icona per utilizzare le operazioni generiche a riquadro singolo.

Tabella D-1: Icone della barra degli strumenti del riquadro generico







Icona	Nome (Suggerimento)
	Elimina questo riquadro
	Espande il riquadro attivo per riempire la finestra
	Nasconde questo riquadro

Tabella D-1: Icone della barra degli strumenti del riquadro generico (continua)

Icona	Nome (Suggerimento)
	Nasconde tutti gli altri riquadri
	Mostra tutti i riquadri attualmente nascosti
	Elimina tutti gli altri riquadri (tenere premuto il tasto Ctrl per eliminare solo i riquadri dopo questo)

Nota: Icone simili sono disponibili anche nella barra degli strumenti principale, che si trova appena sotto la barra dei menu. Facendo clic su una delle icone nella barra degli strumenti principale si ha lo stesso risultato nel riquadro attivo di quando si fa clic sull'icona nel riquadro attivo. Questa barra degli strumenti può essere utile se il riquadro attivo è stato ridimensionato e alcune icone non sono visibili.

Elimina questo riquadro

In presenza di più riquadri aperti, utilizzare questa icona per eliminare il riquadro corrispondente. Se è aperto un solo riquadro, l'icona non è disponibile.

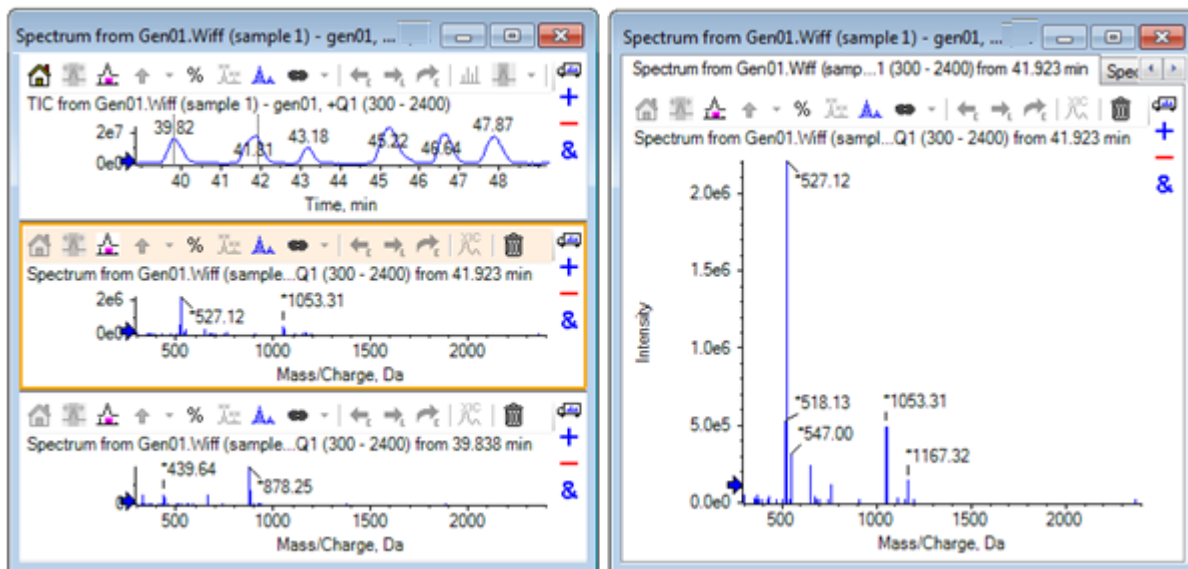
Espande il riquadro attivo per riempire la finestra

Utilizzare questa icona per espandere il riquadro per riempire l'intera finestra o per far tornare il riquadro alla dimensione originale. Se la finestra contiene più riquadri, questa icona si concentra momentaneamente su uno di essi.

Nella finestra in alto di ogni riquadro viene visualizzata una scheda separata. Fare clic sulla scheda appropriata per passare da un riquadro all'altro.

Nota: Se i titoli dei riquadri sono lunghi, tutte le schede potrebbero non essere visibili. Utilizzare i pulsanti freccia a destra delle schede per scorrerle. Fare clic ancora sull'icona per tornare alla visualizzazione originale, mostrando tutti i riquadri.

Figura D-3: Esempio di riquadro allargato



Nasconde questo riquadro

Utilizzare questa icona per nascondere il riquadro corrispondente in modo che gli altri riquadri nella finestra riempiano lo spazio disponibile. Questa icona è utile se si desidera visualizzare un sottoinsieme dei riquadri, ma non si desidera eliminare permanentemente gli altri riquadri.

Nasconde tutti gli altri riquadri

Utilizzare questa icona per nascondere tutti i riquadri tranne il riquadro corrispondente. Il risultato è qualcosa di simile a quando si fa clic sull'icona **Espande il riquadro attivo per riempire la finestra**, perché in entrambi i casi rimane solo il riquadro corrispondente e riempie lo spazio disponibile. La differenza è evidente quando successivamente viene creato un altro riquadro. Nel caso del riquadro ingrandito, il nuovo riquadro diventa attivo e riempie lo spazio disponibile. Nel caso di riquadri nascosti, i due riquadri (il riquadro attivo originale e il nuovo riquadro) sono entrambi visibili.

Mostra tutti i riquadri attualmente nascosti

Utilizzare questa icona per mostrare tutti i riquadri che sono stati nascosti.

Elimina tutti gli altri riquadri





Se non si tiene premuto il tasto Ctrl, questa icona elimina tutti i riquadri nella finestra, a eccezione del riquadro corrispondente. Questa opzione è utile per pulire e avviare una nuova analisi del campione. Verranno cancellati anche tutti i riquadri correntemente nascosti.

Se si tiene premuto il tasto Ctrl, verranno eliminati solo i riquadri che si trovano dopo il riquadro corrispondente. Questa opzione è utile nel caso in cui ci siano molti riquadri aperti e solo un certo numero di quelli iniziali è necessario. In questo caso i riquadri nascosti non verranno eliminati.

Barra degli strumenti a due riquadri

Trascinare l'icona per utilizzare le operazioni a due riquadri (la disponibilità dipende dal tipo di riquadro). Il riquadro d'origine è quello che contiene l'icona selezionata, mentre il secondo è il riquadro di destinazione.

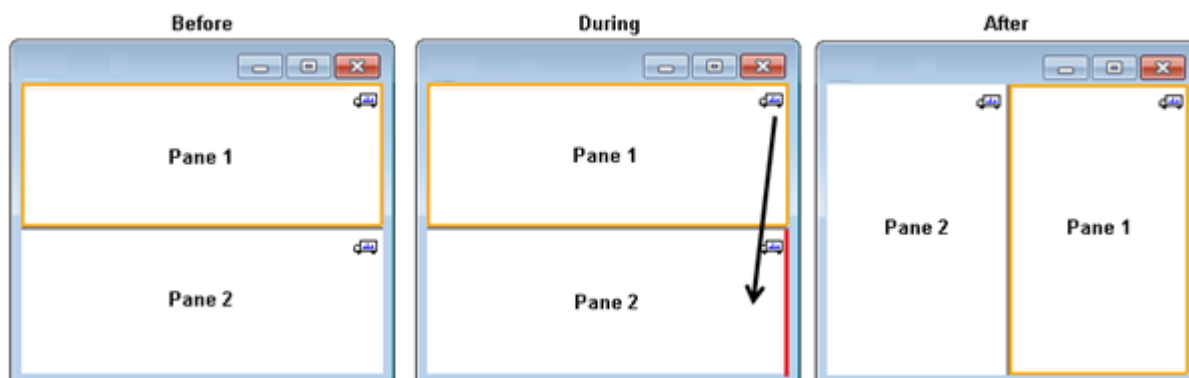
Tabella D-2: Icone della barra degli strumenti a due riquadri

Icona	Nome (Suggerimento)
	Trascinare la selezione per riorganizzare i riquadri.
	Trascinare in un altro grafico per aggiungere i dati attivi ai dati attivi dell'altro grafico. (Tenere premuto il tasto Ctrl per aggiungere i dati attivi a tutti i set di dati dell'altro grafico.)
	Trascinare in un altro grafico per sottrarre i dati attivi da quelli attivi del grafico di destinazione. (Tenere premuto il tasto Ctrl per sottrarre da tutti i set di dati della destinazione. Tenere premuto il tasto Maiusc per mantenere i valori negativi.)
	Trascinare in un altro grafico per sovrapporre i dati attivi nel grafico di destinazione. (Tenere premuto il tasto Ctrl per sovrapporre tutti i set di dati, non solo quelli attivi.)

Trascinare la selezione per riorganizzare i riquadri

Questa icona è mostrata nell'angolo in alto a destra di ogni riquadro ed è utilizzata per cambiare le relative posizioni dei riquadri. Fare clic sull'icona in un riquadro e poi trascinarlo nella parte superiore, inferiore, sinistra o destra di un secondo riquadro. A seconda del punto in cui viene rilasciato il mouse, il primo riquadro cambia le posizioni rispetto al secondo. Mentre si trascina il cursore, un lato del secondo riquadro viene evidenziato in rosso per indicare il punto in cui viene posizionato il primo riquadro. La [Figura D-4](#) mostra il risultato del trascinamento di questa icona dal riquadro superiore alla parte destra del riquadro inferiore.

Figura D-4: Risultato del trascinamento dell'icona dal riquadro superiore alla parte destra del riquadro inferiore.



Nota: È possibile trascinare i riquadri da una finestra all'altra.

Esercitazione per Explorer

Trascinare in un altro grafico per aggiungere i dati attivi ai dati attivi dell'altro grafico

Utilizzare questa icona per sommare due set di dati insieme, punto per punto. I dati sorgente (del riquadro sul quale è stato fatto clic in origine) sono aggiunti ai dati di destinazione (il riquadro sopra il quale viene rilasciata l'icona). Il titolo dei dati che si modificano si aggiorna per indicare che è stato modificato.

Nota: È possibile solo aggiungere due set di dati dello stesso tipo insieme. Ad esempio, non è possibile aggiungere uno spettro a un cromatogramma.

Nota: Se il grafico di destinazione contiene più di una traccia sovrapposta, come impostazione predefinita i dati di origine sono aggiunti solo ai dati di destinazione attivi. Se si preme il tasto Ctrl, è aggiunta l'origine a tutti i set di dati di destinazione.

Trascinare in un altro grafico per sottrarre i dati attivi da quelli attivi del grafico di destinazione

Utilizzare questa icona per sottrarre i dati di origine dai dati di destinazione. Questa icona è molto utile per sottrarre il fondo di uno spettro di massa.

Nota: Se il grafico di destinazione contiene più di una traccia sovrapposta, allora, come da impostazione predefinita, i dati di origine vengono sottratti solo dai dati di destinazione attivi. Tenere premuto il tasto Ctrl per sottrarre l'origine da tutto l'insieme di dati di destinazione.

Suggerimento! Normalmente, i dati per i quali l'intensità nell'origine è maggiore di quella di destinazione non vengono conservati. Ciò significa che i valori negativi y vengono scartati. Se si preme il tasto Maiusc, si conservano i punti con intensità negativa.

Trascinare in un altro grafico per sovrapporre i dati attivi nel grafico di destinazione

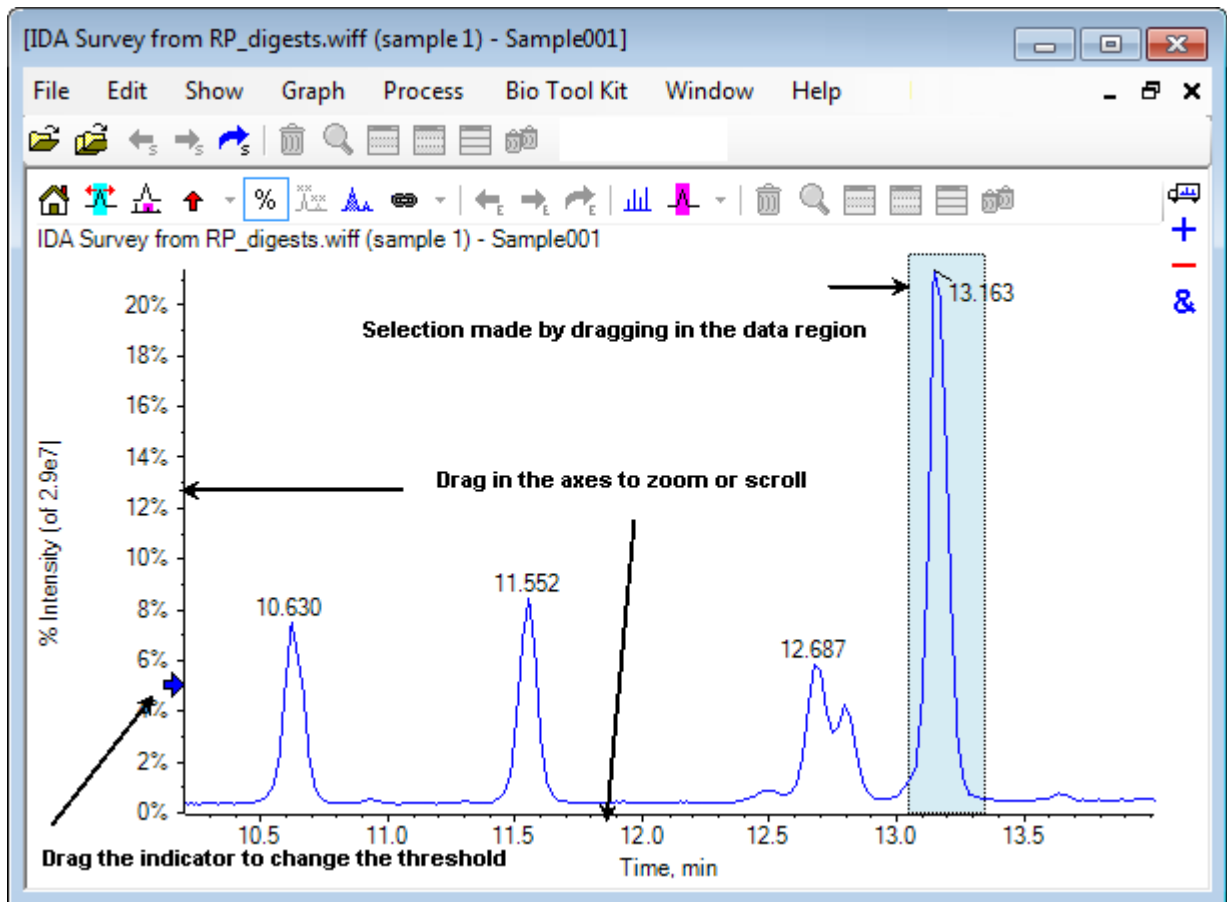
Utilizzare questa icona per sovrapporre i dati attivi nel grafico di origine sul grafico di destinazione. Dopo il completamento dell'operazione, il grafico di destinazione conterrà una nuova serie con una copia dei dati di destinazione.

Nota: Se il grafico di origine contiene più di una traccia sovrapposta, come impostazione predefinita solo una copia dei suoi dati attivi verrà spostata nel grafico di destinazione. Tenere premuto il tasto Ctrl per sovrapporre una copia di tutti i set di dati nel grafico di origine sul grafico di destinazione.

Grafici

I grafici sono riquadri che consentono la visualizzazione dei dati e l'interazione con gli stessi. Diverse opzioni sono comuni a tutti i grafici, mentre altre dipendono dal tipo di dati mostrati.

Figura D-5: Grafici




I comandi generici sono riassunti come segue:

- L'ingrandimento e lo scorrimento sono eseguiti trascinando il cursore nell'area dell'asse x o y del grafico. Facendo doppio clic si ripristina l'asse all'intervallo originale e facendo clic nell'asse mentre si preme il tasto **Maiusc** riporta il grafico alla visualizzazione precedente (annullare per ingrandimento e scorrimento).
- È possibile posizionare un indicatore di soglia trascinandolo. La soglia di solito determina quali picchi siano etichettati ed è talvolta utilizzata per determinare quali picchi siano elaborati.
- Le selezioni sono eseguite trascinando nell'area dati. Le selezioni sono utilizzate per definire una parte dei dati da utilizzare o elaborare. Selezionare aree multiple premendo il tasto **Maiusc** mentre si trascina. Premere il tasto **Ctrl** per eseguire selezioni negli assi x e y.













Barra degli strumenti specifica del grafico

Tabella D-3: Icone della barra degli strumenti specifica del grafico

Icona	Nome (Suggerimento)
	Passa dal grafico ingrandito alla pagina iniziale

Esercitazione per Explorer

Tabella D-3: Icone della barra degli strumenti specifica del grafico (continua)

Icona	Nome (Suggerimento)
	Esegue l'ingrandimento della selezione a visualizzazione a schermo intero
	Mostra il grafico "Zoom" (per monitorare l'ingrandimento corrente). Fare riferimento alla Figura D-6 .
	Aggiunge i marcatori a freccia ai picchi selezionati
	Utilizzare la percentuale dell'asse y
	Etichettare tutte le tracce sovrapposte
	Riempire i picchi
	Collega l'asse x del grafico ad altri (con le stesse unità) nella finestra (Tenere premuto il tasto Control per applicare a tutti i grafici correnti)
	Scambia dati per utilizzare l'esperimento precedente
	Scambia dati per utilizzare il prossimo esperimento
	Scambia dati per utilizzare l'esperimento selezionato
	Visualizza uno spettro per la selezione
	Impostare l'intervallo di sottrazione del fondo

Nota: Le ultime sei icone in questa barra degli strumenti, a cominciare dall'icona Elimina questo riquadro, sono descritte in [Barra degli strumenti del riquadro generico](#).

Passa dal grafico ingrandito alla pagina iniziale

Se il tracciato è stato ingrandito, utilizzare questa icona per tornare alla visualizzazione iniziale, ovvero la visualizzazione in cui gli assi x e y mostrano i propri intervalli predefiniti e tutti i dati disponibili sono visibili. Facendo doppio clic sull'asse x si riporta il grafico alla visualizzazione iniziale. Facendo doppio clic sull'asse y si riporta solo tale asse al suo intervallo completo.

Esegue l'ingrandimento della selezione a visualizzazione a schermo intero

Utilizzare questa icona per ingrandire il tracciato in modo che la regione selezionata riempi l'intero spazio disponibile. Prima di selezionare questa icona, trascinare all'interno del tracciato per eseguire una selezione. È anche possibile ingrandire trascinando direttamente sull'asse x (o asse y) del tracciato.

Mostra il grafico "Zoom" (per monitorare l'ingrandimento corrente)

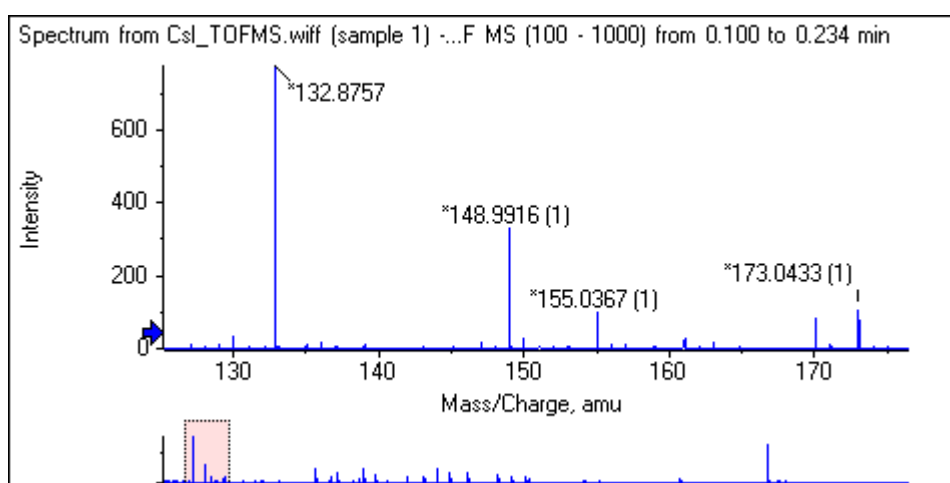
Utilizzare questa icona per mostrare una piccola copia del grafico sotto il grafico principale come mostrato nella [Figura D-6](#). Questo grafico generale mostra sempre l'intero intervallo

disponibile e indica l'area ingrandita del grafico principale mediante una selezione rosa. La selezione viene aggiornata man mano che il grafico principale viene ingrandito.

Quando la selezione del picco viene trascinata in una nuova posizione, il grafico principale scorre come richiesto. Per regolare la larghezza, trascinare il cursore accanto al bordo sinistro o destro della selezione. In questo caso, è possibile ingrandire il grafico principale secondo necessità.

Questa funzionalità è particolarmente utile per gli spettri di massa ad alta risoluzione, vista la necessità di ingrandimenti frequenti per visualizzare i dettagli. Il grafico generale consente ancora all'utente di tenere traccia della posizione della regione ingrandita rispetto all'intervallo di massa.

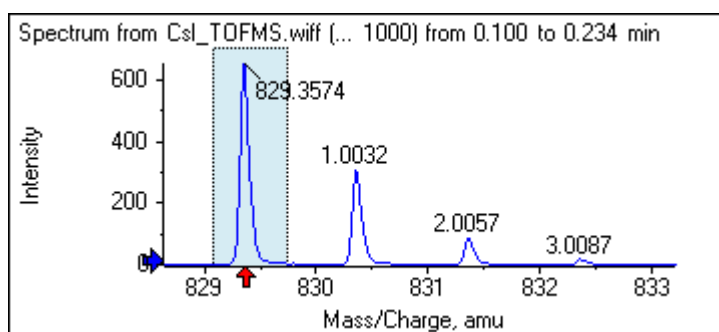
Figura D-6: Mostrare il grafico generale



Aggiunge i marcatori a freccia ai picchi selezionati

Utilizzare questa icona per aggiungere un marcatore a freccia al picco più grande all'interno della regione del grafico selezionata al momento. La [Figura D-7](#) mostra il risultato per aver fatto clic su questa icona quando il picco 829 (approssimato) è selezionato come mostrato.

Figura D-7: Aggiungere un singolo marcatore a freccia



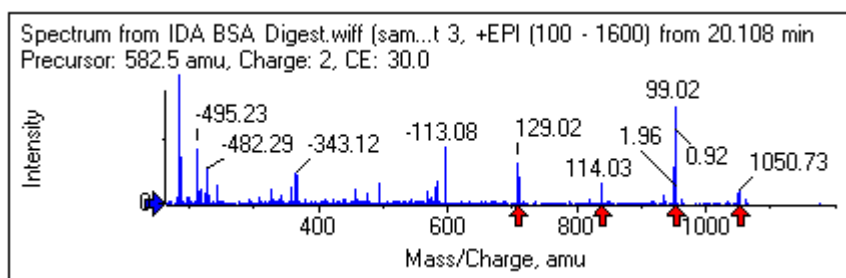
Le frecce fungono da punti di riferimento nei dati. Per impostazione predefinita, i picchi che non sono vicini a una freccia vengono etichettati con la distanza dalla freccia più prossima. Il picco vicino alla freccia con il valore x più grande viene etichettato con l'effettivo valore

Esercitazione per Explorer

x. I picchi vicini a una freccia diversa dall'ultima vengono etichettati rispetto alla freccia con un valore x più alto. Nella [Figura D-7](#), il picco a circa 829 Da viene etichettato con l'effettivo valore m/z e i picchi dell'isotopo vengono etichettati con la loro distanza da questo picco. I picchi a sinistra della freccia (non mostrata) verranno etichettati con valori negativi.

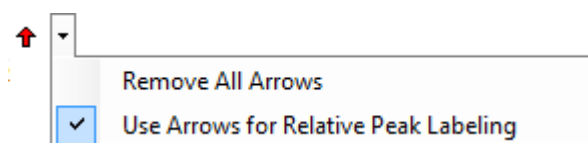
Le frecce vengono utilizzate principalmente con gli spettri e rappresentano un modo comodo per individuare le differenze di massa previste, quali isotopi, perdite neutre negli spettri MS/MS, ecc. La [Figura D-8](#) mostra uno spettro MS/MS di un peptide in cui le frecce sono state aggiunte a valori corrispondenti alle perdite neutre di residui amminoacidi. Ad esempio, il picco etichettato 99.02 potrebbe essere una perdita di valina dal picco a 1050.73 Da, quello successivo etichettato 114.03 potrebbe essere un'ulteriore perdita di asparagina, ecc. Il picco etichettato -113.08 potrebbe essere una perdita di leucina o isoleucina dal picco etichettato 129.02 (con un rapporto effettivo m/z vicino a 709 Da).

Figura D-8: Aggiungere più marcatori a freccia



Se non viene utilizzata questa etichettatura per il picco relativo, deselectare la voce di menu **Use Arrows for Relative Peak Labeling** mostrata nella [Figura D-9](#). In questo caso le frecce servono per contrassegnare i picchi di un certo interesse.

Figura D-9: Menu Add Arrow Marker



Gli utenti possono trascinare una freccia in una nuova posizione. Se la freccia viene trascinata nell'area del tracciato, l'operazione viene annullata. Se la freccia viene trascinata all'esterno del grafico, la freccia viene eliminata. È possibile eliminare le frecce selezionando **Remove All Arrows** dal menu mostrato nella [Figura D-9](#).

Utilizza Percentuale Asse Y

Questa icona determina il ridimensionamento dell'asse y. Se selezionata, questa opzione consente di scalare i tracciati sovrapposti in modo che il valore massimo di ogni tracciato sia pari al 100%. L'utilizzo di un asse y percentuale è utile se le intensità assolute dei tracciati sovrapposti sono molto diverse.

Etichettare tutte le tracce sovrapposte

Per impostazione predefinita, se si sovrappongono più tracciati, verrà etichettato solo il tracciato attivo. Fare clic su questa icona per etichettare tutte le tracce. Fare nuovamente clic sull'icona per rimuovere tutte le etichette e tornare alla visualizzazione originale.

Riempi i picchi

Fare clic su questa icona per riempire i picchi dei dati attivi utilizzando alternativamente riempimenti chiari e scuri. Questa funzione è utile se si desidera visualizzare l'inizio e la fine precisi dei picchi. Fare clic ancora sull'icona per rimuovere il riempimento e tornare alla visualizzazione originale.

Collega l'asse x del grafico ad altri (con le stesse unità) nella finestra

Gli assi di due o più grafici possono essere collegati insieme in modo che quando si ingrandisce un asse in un grafico, gli altri vengano automaticamente regolati per visualizzare lo stesso intervallo. Questa funzione può essere utile per confrontare i dati in questi grafici. Un'alternativa è quella di sovrapporre i set di dati nello stesso grafico. Comunque, ciò non è sempre desiderabile.

Fare clic sull'icona **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** in ogni grafico da collegare. Tenere premuto il tasto **Ctrl** facendo clic sull'icona per collegare tutti i grafici correnti con le stesse unità dell'asse x nella stessa finestra del grafico attivo. Ad esempio, se si dispone di tre spettri visibili e si fa clic su **Ctrl** + l'icona **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** (Collega l'asse x del grafico ad altri (con le stesse unità) nella finestra) in uno di essi, tutti e tre gli spettri sono collegati l'uno all'altro.

Nota: Ad esempio, se successivamente si genera un nuovo spettro, questo non verrà collegato agli altri. Per collegare il nuovo spettro, fare clic sull'icona **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** associata.

Per impostazione predefinita, vengono collegati solo gli assi x dei grafici. In questo caso, se si ingrandisce un grafico manualmente, gli altri ingrandiranno automaticamente l'asse y in modo che i picchi all'interno della visualizzazione riempiano lo spazio disponibile.

Per scollegare un grafico collegato, fare clic sull'icona **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** nel grafico adatto. Tenere premuto il tasto **Ctrl** per scollegare tutti i grafici con le stesse unità dell'asse x nella stessa finestra.

Scambia dati per utilizzare il prossimo esperimento

Se i dati attivi del grafico sono associati a un esperimento specifico diverso dall'ultimo, questa icona sostituisce i dati con quelli dello stesso tipo, ma relativi all'esperimento successivo.

Ad esempio, se il cromatogramma di corrente ionica totale (TIC) è attivo per l'esperimento 2, fare clic su questa icona per passare al TIC dell'esperimento 3. Se uno spettro è attivo per l'esperimento 2 in un dato momento, fare clic su questa icona per passare a uno spettro dello stesso periodo per l'esperimento 3.

Esercitazione per Explorer

Scambia dati per utilizzare l'esperimento precedente

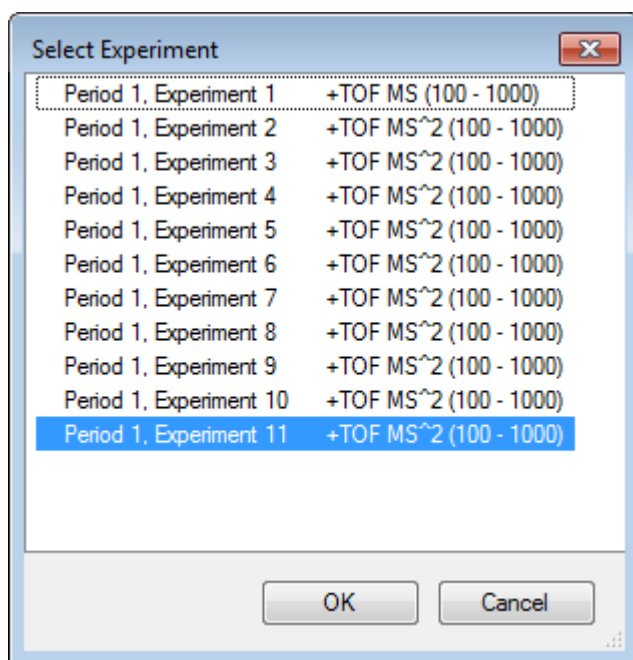
Se i dati attivi del grafico sono associati a un esperimento specifico diverso dal primo, questa icona sostituisce i dati con dati dello stesso tipo ma relativi all'esperimento precedente.

Ad esempio, se il cromatogramma di corrente ionica totale (TIC) è attivo per l'esperimento 3, fare clic su questa icona per passare al TIC dell'esperimento 2. Se uno spettro è attivo per l'esperimento 3 in un dato momento, fare clic su questa icona per passare a uno spettro dello stesso periodo per l'esperimento 2.

Scambia dati per utilizzare l'esperimento selezionato

Usare questa icona per selezionare un esperimento specifico da utilizzare senza doverli sfogliare uno a uno. Facendo clic sull'icona si apre una finestra di dialogo che elenca tutti gli esperimenti disponibili. Il campione attivo è evidenziato. Fare clic su un esperimento nella lista per selezionarlo e quindi fare clic su **OK**. Fare riferimento alla [Figura D-10](#).

Figura D-10: Finestra di dialogo Select Experiment



Visualizza uno spettro per la selezione


Utilizzare questa icona per generare uno spettro di massa mediato sull'intervallo di tempo della selezione attuale nel grafico. Lo stesso risultato può essere ottenuto facendo doppio clic nella selezione.

Impostare l'intervallo di sottrazione del fondo

Utilizzare questa icona per eseguire la sottrazione automatica del fondo per spettri generati a partire dal cromatogramma.

Barra degli strumenti specifica dello spettro

Tabella D-4: Icone della barra degli strumenti specifica dello spettro

Icona	Nome (Suggerimento)
	Visualizza un XIC per la selezione

Nota: Le prime undici icone in questa barra degli strumenti, a cominciare dall'icona Passa dal grafico ingrandito alla pagina iniziale, sono descritte in [Barra degli strumenti specifica del grafico](#).

Nota: Le ultime sei icone in questa barra degli strumenti, a cominciare dall'icona Elimina questo riquadro, sono descritte in [Barra degli strumenti del riquadro generico](#).

Visualizza un XIC per la selezione

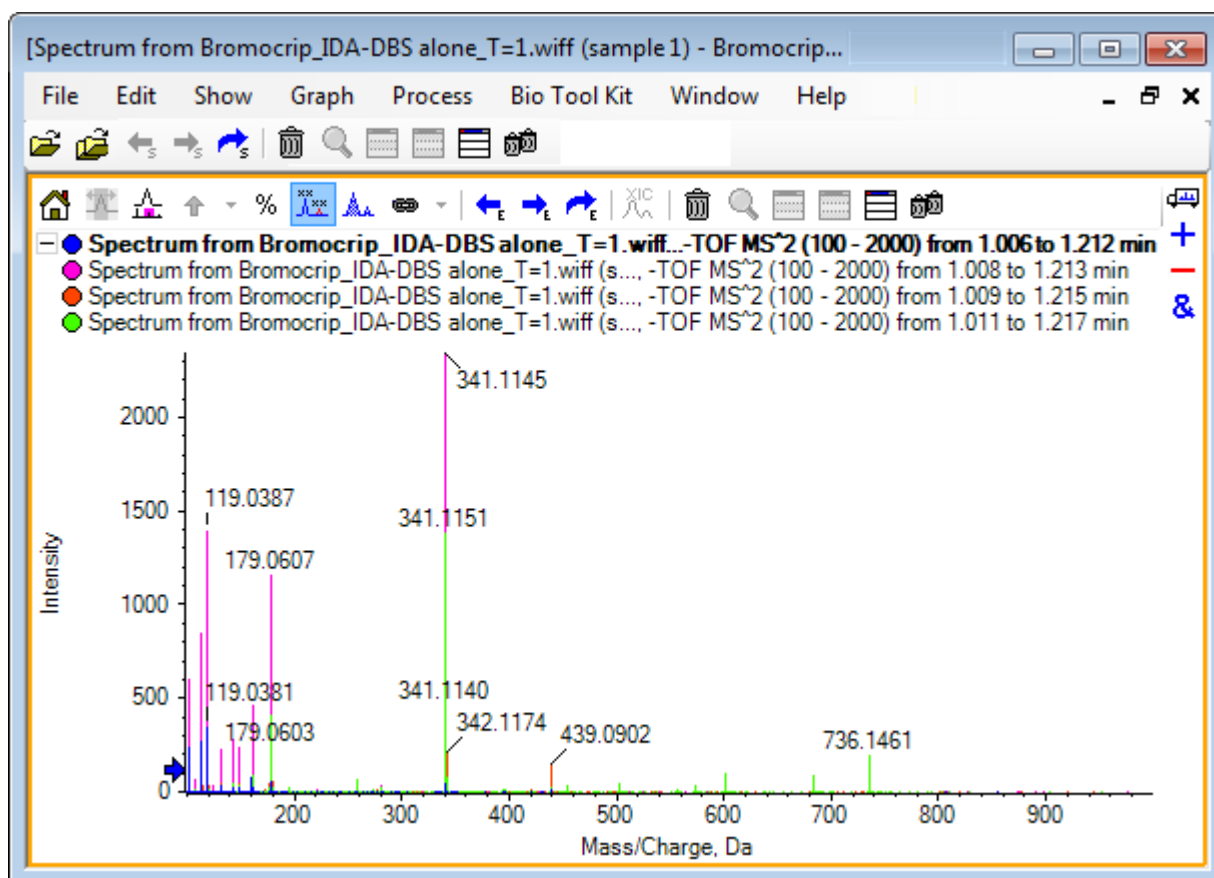
Utilizzare questa icona per generare un cromatogramma degli ioni estratti (XIC) sommato sull'intervallo di massa della selezione attuale nel grafico.

Sovrapposizioni

I grafici possono contenere diverse tracce, denominate sovrapposizioni, che condividono gli stessi assi in modo che possano essere confrontate facilmente. Possono essere generati trascinando l'icona appropriata a due riquadri (l'icona **Trascinare in un altro grafico per sovrapporre i dati attivi nel grafico di destinazione**) e sono prodotti automaticamente con alcuni comandi di creazione di riquadri. Fare riferimento a [Cromatogrammi e spettri](#).

Nella [Figura D-11](#), il grafico contiene quattro spettri con l'icona **Etichettare tutte le tracce sovrapposte** selezionata. L'area di intestazione del grafico mostra i titoli per i due spettri e cerchi colorati che indicano il colore della traccia. La traccia attiva è mostrata in grassetto. La traccia è la destinazione per qualsiasi operazione di elaborazione, ad esempio dati di soglia, smussamento, ecc., e normalmente sarebbe la sola etichettata. Facendo clic sull'icona alla sinistra del titolo, l'icona è modificata ed è disegnato solo il titolo della traccia attiva. Questa funzione è utile quando esistono molte sovrapposizioni. Fare nuovamente clic sull'icona per invertire il processo. Se esistono molte tracce e il cursore è spostato sui titoli, il cursore cambia in una freccia a doppia punta e agisce come una barra di scorrimento quando è trascinato, in modo che sia possibile accedere a tutti i titoli.

Figura D-11: Grafico contenente quattro spettri con l'icona Etichettare tutte le tracce sovrapposte selezionata



Esistono diversi modi di commutare la traccia attiva:

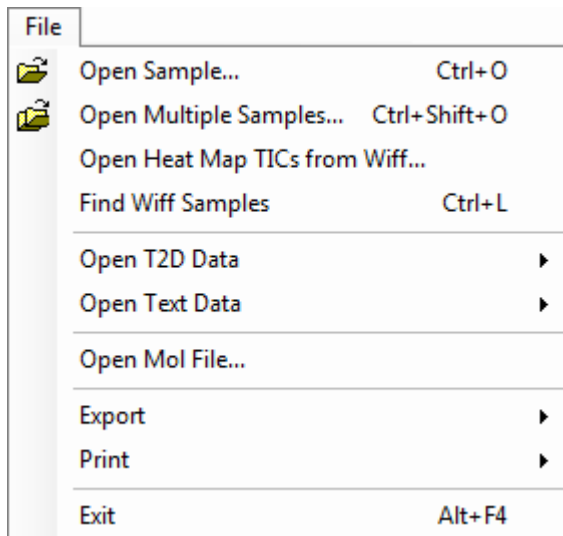
- Fare clic sul cerchio colorato accanto al titolo
- Fare clic sul titolo stesso
- Fare clic su un punto dati nella traccia (non sulla traccia stessa)

Facendo clic con il pulsante destro del mouse su un grafico con sovrapposizioni è mostrato un menu contestuale contenente comandi che è possibile utilizzare per modificare visivamente le tracce mostrate. Le opzioni **Remove Active Trace** e **Remove All Traces Except Active** funzionano come previsto.

Aprire i file

Come mostrato nella [Figura D-12](#), il software può aprire diversi tipi di file di dati e possiede comandi per aprire campioni singoli o multipli.

Figura D-12: Menu File

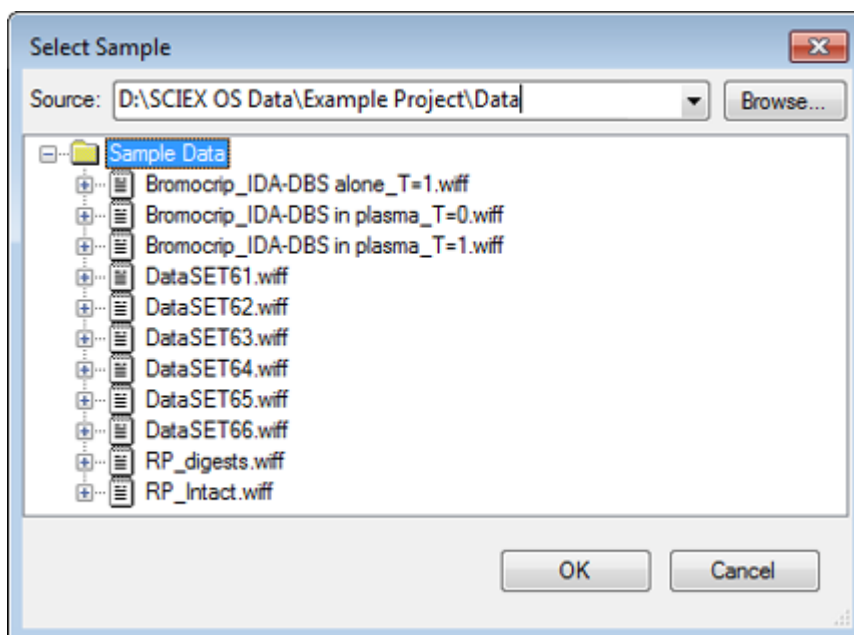


Aprire un file campione

L'opzione **Open Sample** apre la finestra di dialogo **Select Sample**. Fare riferimento alla [Figura D-13](#).

Questa finestra di dialogo permette di selezionare un file singolo. La visualizzazione che appare dipende dal comando selezionato, con un file singolo .scan che mostra uno spettro o un cromatogramma a corrente ionica totale (TIC) e più file di scansione .wiff che mostrano un TIC (la somma di tutti gli esperimenti, se ce n'è più di uno).

Figura D-13: Finestra di dialogo Select Sample



Esercitazione per Explorer

Fare clic sull'icona a sinistra del file .wiff per mostrare tutti i campioni all'interno del file e quindi selezionare il nome del file richiesto. Se c'è un solo campione all'interno del file, selezionare il nome del file e fare clic su **OK**.

Aprire più file campioni

Le opzioni **Open Multiple Samples** e **Open Heat Map TICs from Wiff** aprono la finestra di dialogo **Select Samples**. Fare riferimento alla [Figura D-14](#).

Il pannello sinistro corrisponde alla finestra di dialogo **Open** che consente di navigare nelle cartelle e di specificare i file, mentre il pannello destro indica i file che saranno aperti quando si fa clic su **OK**. I campioni possono essere trasferiti da sinistra a destra come segue:

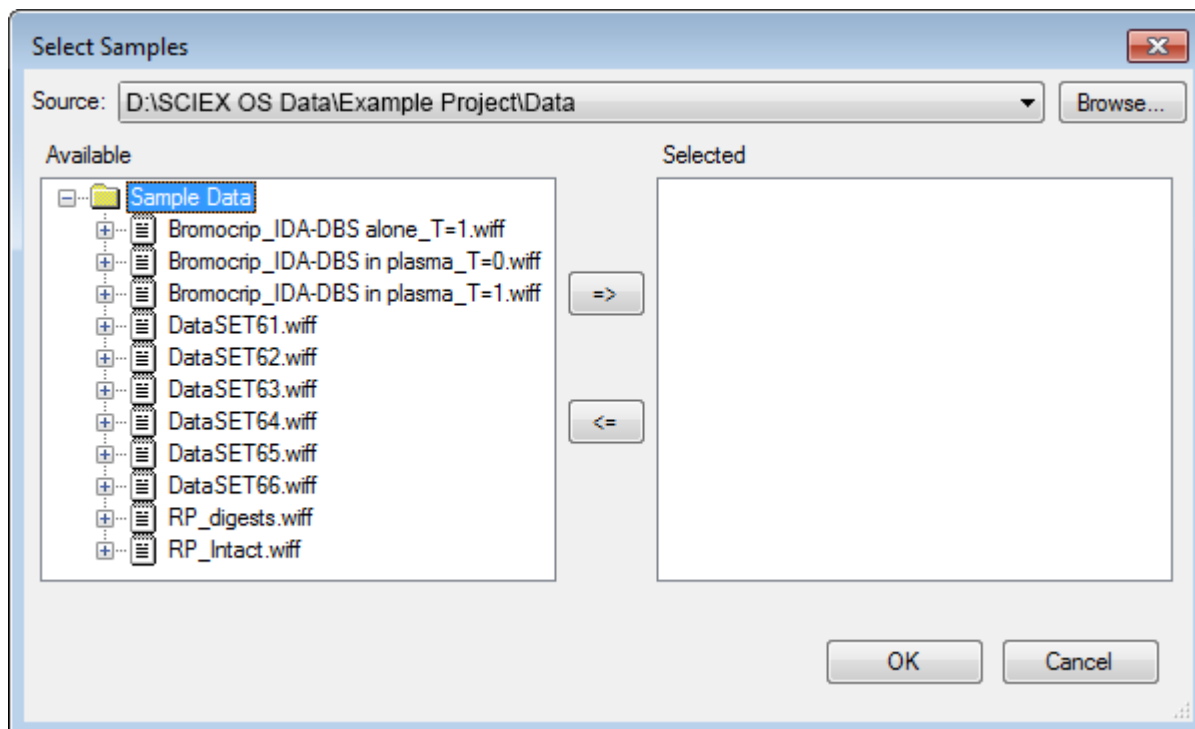
- Espandere il file wiff, selezionare il campione, quindi fare clic sulla freccia che punta a destra.
- Espandere il file wiff, selezionare il campione, quindi trascinarlo sul pannello di destra.
- Espandere il file wiff e quindi fare doppio clic sul campione.

Se il file contiene più campioni, possono essere tutti trasferiti selezionando il file wiff e facendo clic sulla freccia che punta a destra, oppure selezionando il file .wiff e quindi trascinandolo sul pannello di destra.

I campioni possono essere trasferiti da destra a sinistra come segue:

- Espandere il file wiff, selezionare il campione, quindi fare clic sulla freccia che punta a sinistra.
- Espandere il file wiff, selezionare il campione, quindi trascinarlo sul pannello di sinistra.
- Fare doppio clic sul campione.

Figura D-14: Finestra di dialogo Select Samples



Cromatogrammi e spettri

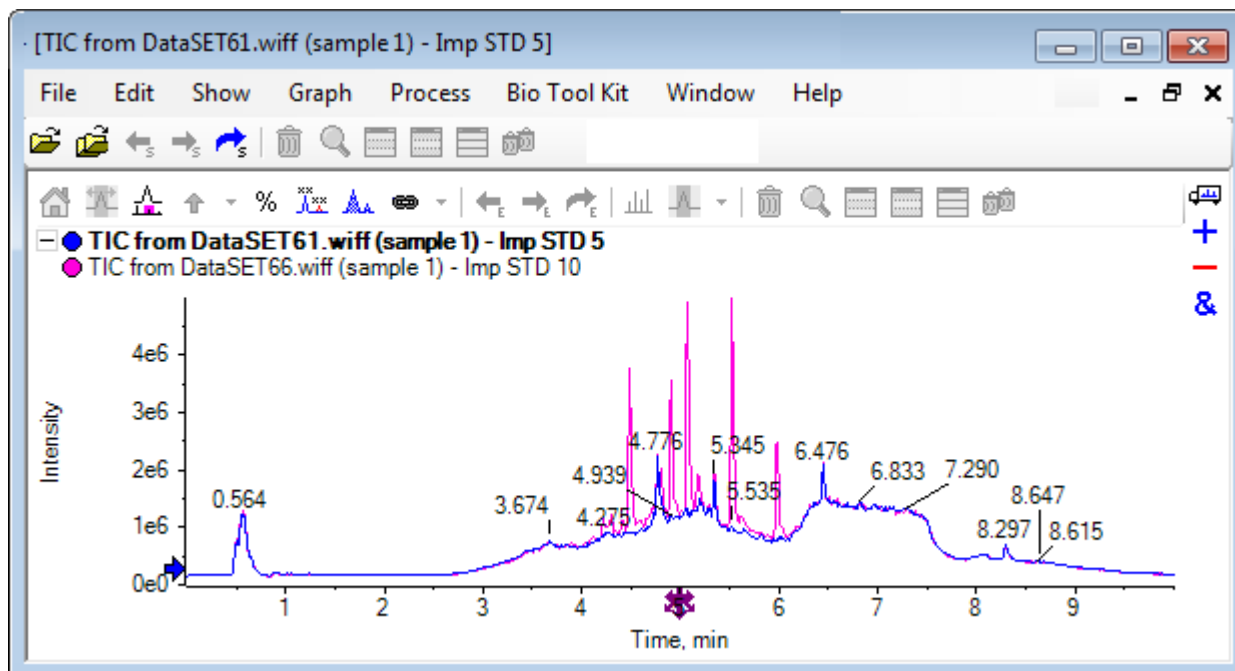
Total Ion Chromatogram (Cromatogramma corrente ionica totale) (TIC), gli spettri ed Extracted Ion Chromatogram (Cromatogramma ioni estratti) (XIC) sono le visualizzazioni dati più ampiamente utilizzate quando si esplorano e rivedono dati. Il software fornisce collegamenti tra queste visualizzazioni dati, in modo che gli utenti possano rapidamente generare spettri e quindi XIC per determinare se i picchi negli spettri provengano da uno o più picchi cromatografici.

Cromatogramma a corrente ionica totale (TIC)

È la visualizzazione predefinita mostrata quando un file wiff di scansione o multi-scansione è aperto. Il TIC mostrato corrisponde a un cromatogramma creato sommando le intensità di tutti gli ioni in ogni spettro e quindi riportando la somma in funzione del tempo di ritenzione.

Se il campione è stato acquisito utilizzando gli esperimenti con loop, il TIC mostrato corrisponde alla somma delle intensità di entrambi gli esperimenti e viene disegnato un indicatore speciale a freccia nell'asse x per indicarla. Fare riferimento alla [Figura D-15](#). Se si fa clic due volte sull'indicatore, viene aperto un nuovo riquadro che mostra i TIC sovrapposti individuali per ogni esperimento.

Figura D-15: TIC



Se il campione contiene dati IDA, selezionare qualunque IDA Explorer, che è un modo grafico di mostrare i tempi di massa e ritenzione dei precursori selezionati o di un TIC convenzionale. Se si seleziona l'opzione TIC convenzionale, vengono visualizzati i TIC separati per la misurazione IDA e la somma dipendente dell'IDA.

Mostrare il TIC in qualsiasi momento facendo clic su **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** per aprire una finestra di dialogo che permette la selezione di qualsiasi esperimento. Selezionare Period 1 per mostrare il TIC per tutti gli esperimenti, mentre le altre voci corrispondono ai singoli TIC. Usare **Maiusc+** o **Ctrl+clic** per selezionarne più di uno.

Spettri

Se un file contiene solo un singolo spettro, lo spettro viene visualizzato quando il file viene aperto.

Per i dati con scansioni multiple, gli spettri sono derivati da cromatogrammi effettuando una selezione nel cromatogramma e facendo doppio clic al suo interno o facendo clic sull'icona **Visualizza uno spettro per la selezione**. Trascinare la selezione rettangolare del cromatogramma per aggiornare lo spettro per mostrare la nuova area.

Selezionare aree multiple premendo il tasto **Maiusc** dopo aver completato la prima selezione. Fare doppio clic su una di queste scelte o fare clic sull'icona **Visualizza uno spettro per la selezione** per creare un nuovo riquadro dello spettro con gli spettri sovrapposti.

Per l'IDA, si apre una richiesta di sovrapporre tutti gli spettri dipendenti o semplicemente di mostrare il primo spettro. In quest'ultimo caso, utilizzare i tasti freccia sinistra e destra per mostrare gli spettri.

Nota: Questa finestra di dialogo ha una casella di controllo Only show again if the shift key is down.

Creare gli spettri di fondo sottratti in due modi:

- Creare gli spettri separati per le aree di picco e di fondo e poi trascinare l'icona sottratta a due pannelli dallo spettro del fondo allo spettro del picco.
- Definire un'area di fondo facendo una o due selezioni nel cromatogramma e facendo clic sull'icona **Impostare l'intervallo di sottrazione del fondo**. Gli spettri creati quando viene definita un'area di fondo vengono sottratti automaticamente dal fondo. L'area di fondo è mostrata nel cromatogramma come una selezione rettangolare di colore rosso chiaro e sia questa sia le selezioni dello spettro possono essere spostate per modificare i dati visualizzati. Quando viene definita un'area di fondo, può essere rimossa facendo clic sulla freccia accanto all'icona e quindi selezionando **Clear Subtraction Range**.

Nota: I marcatori a freccia sono utili negli spettri perché le etichette dei picchi possono essere relative al picco più vicino contrassegnato da una freccia e questo fornisce un modo rapido per determinare le masse di perdite o addotti. Se esistono sovrapposizioni multiple e l'icona Etichettare tutte le tracce sovrapposte è selezionata, ogni sovrapposizione verrà etichettata rispetto alla freccia.

Cromatogramma ioni estratti (XIC)

I XIC possono essere generati in due modi:

- Facendo clic su **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)**.

Questa azione apre una finestra di dialogo in cui è possibile digitare le masse iniziale e finale o il centro e i valori di larghezza, a seconda della modalità. Ciò può essere modificato nel menu contestuale, aperto facendo clic con il pulsante destro del mouse all'interno della finestra di dialogo. Il menu contestuale fornisce inoltre accesso ad altri utili comandi, come l'impostazione di una larghezza predefinita e l'importazione o esportazione dell'elenco delle masse. Gli utenti possono anche rendere i valori di massa persistenti, in modo che siano utilizzati automaticamente fino alla rimozione.

- Eseguendo una o più selezioni in uno spettro e quindi facendo doppio clic in una di queste o facendo clic sull'icona **Visualizza un XIC per la selezione**.

Queste azioni generano un XIC corrispondente a ciascuna selezione. Come impostazione predefinita, il programma determina il picco massimo in ciascun intervallo di selezione e imposta automaticamente il XIC in modo che corrisponda ai valori di massa alti e bassi a metà altezza per il picco. Se si preme il tasto **Ctrl**, si utilizza l'intera larghezza della selezione.

In entrambi i casi, è mostrato un grafico contenente una sovrapposizione per ciascuna selezione. Le selezioni si trasformano in collegamenti. Il trascinamento dei collegamenti aggiorna i XIC.

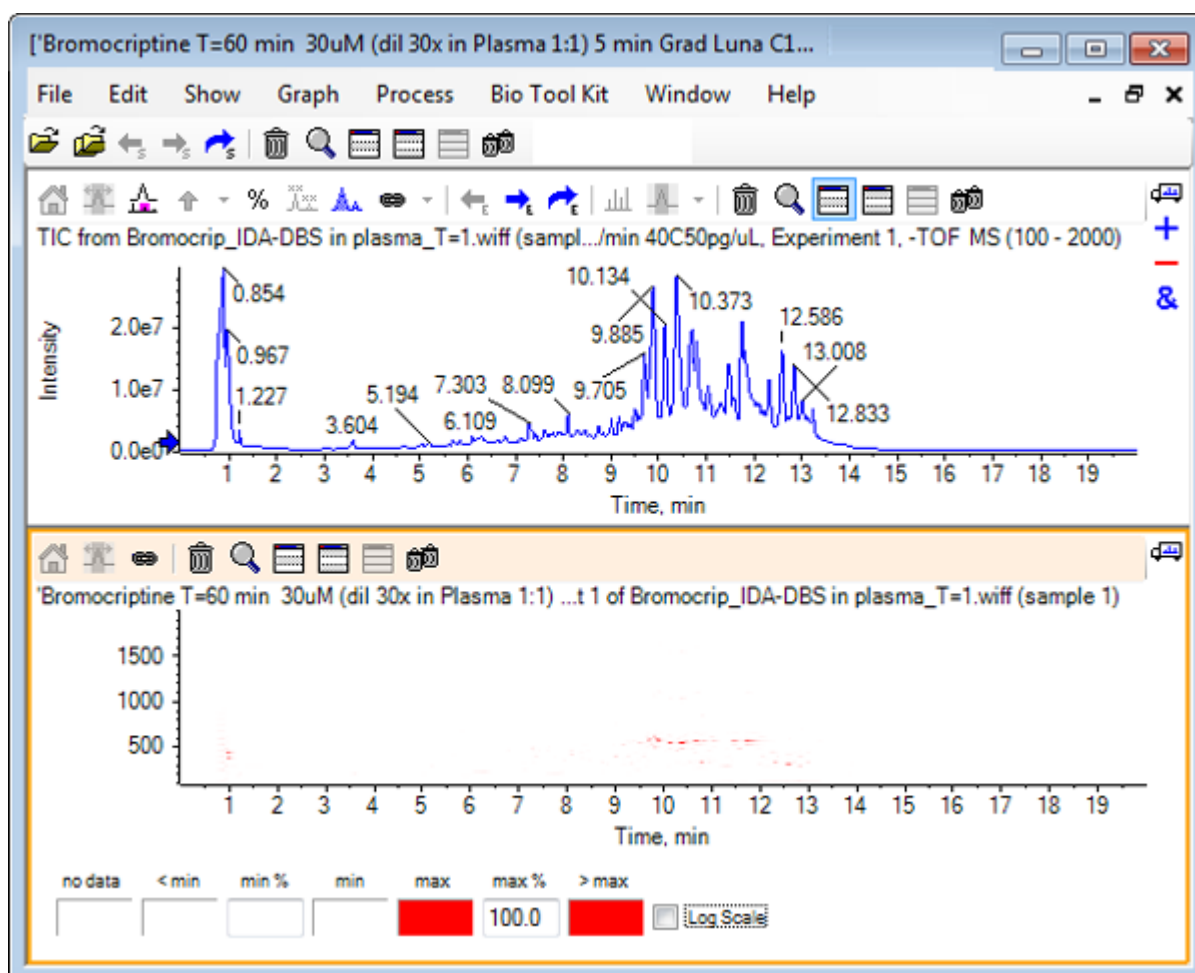
Esercitazione per Explorer

Nota: I XIC sono normalmente calcolati e mostrati per l'intero intervallo cromatografico, che può essere lento specialmente se esistono più selezioni e i dati derivano da uno strumento ad alta risoluzione e contengono molte scansioni. Una funzionalità utile è di limitare gli intervalli XIC a una finestra più piccola attorno al tempo di ritenzione dello spettro utilizzato per generarli. Ciò può essere impostato dalla scheda XIC della finestra di dialogo mostrata dopo aver fatto clic sulla scheda **Edit > Options > XIC**.

Contour Plot e mappe termiche

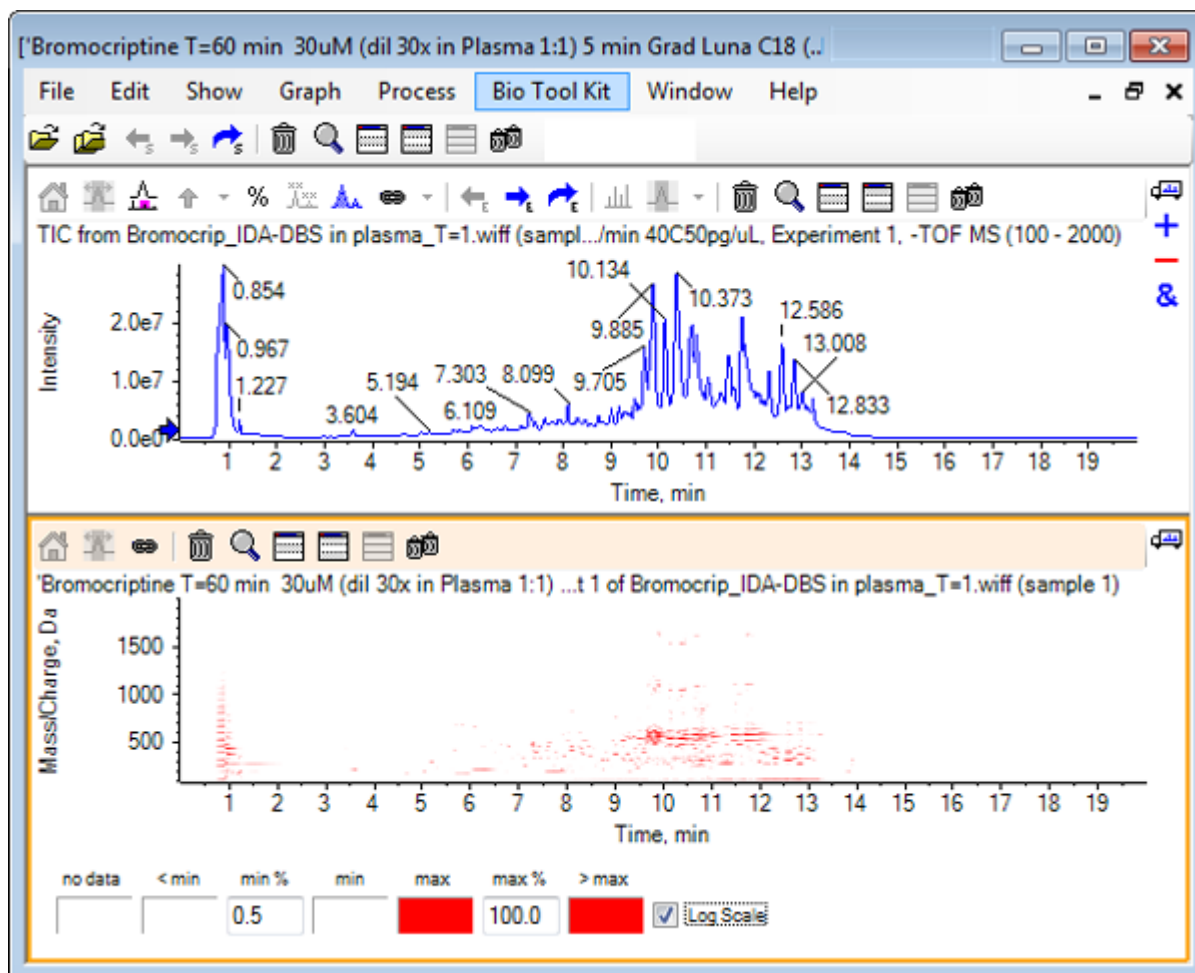
Un Contour Plot LC/MS (**Show > LC/MS Contour Pane**) mostra tutti i dati di un campione LC/MS in un riquadro singolo. L'esempio nella [Figura D-16](#) mostra un TIC e la corrispondente mappa di contorno, che mostra i dati come mappa del rapporto m/z rispetto al tempo di ritenzione con il colore di intensità codificato. In questo caso, sono anche mostrati i controlli di colore ma possono essere nascosti facendo clic con il pulsante destro del mouse nella visualizzazione e cancellando l'opzione **Show Appearance Controls**. Poiché i tracciati di colore e i cromatogrammi hanno lo stesso asse x, possono essere collegati insieme in modo tale che l'ingrandimento e lo scorrimento influenzino entrambe le visualizzazioni similmente a fini di confronto.

Figura D-16: TIC e mappa di contorno corrispondente



Il controllo di colore utilizza una tavolozza di 256 colori per mostrare le intensità nell'intervallo definito da **min %** e **max %**. Le intensità inferiori a **min %** sono disegnate utilizzando **< min** e quelle superiori a **max %** sono disegnate utilizzando **> max**. Se i colori utilizzati per **< min** e nessun dato è uguale (come qui), qualsiasi punto di dati inferiore a **min %** scompare. Questa è una forma di gestione della soglia visiva che può semplificare il tracciato come mostrato nella [Figure 1-11](#), mentre il valore **min %** è stato aumentato a 0,5%. Per maggiori informazioni sui controlli di colore, fare riferimento alla *Guida per l'Utente del Sistema*.

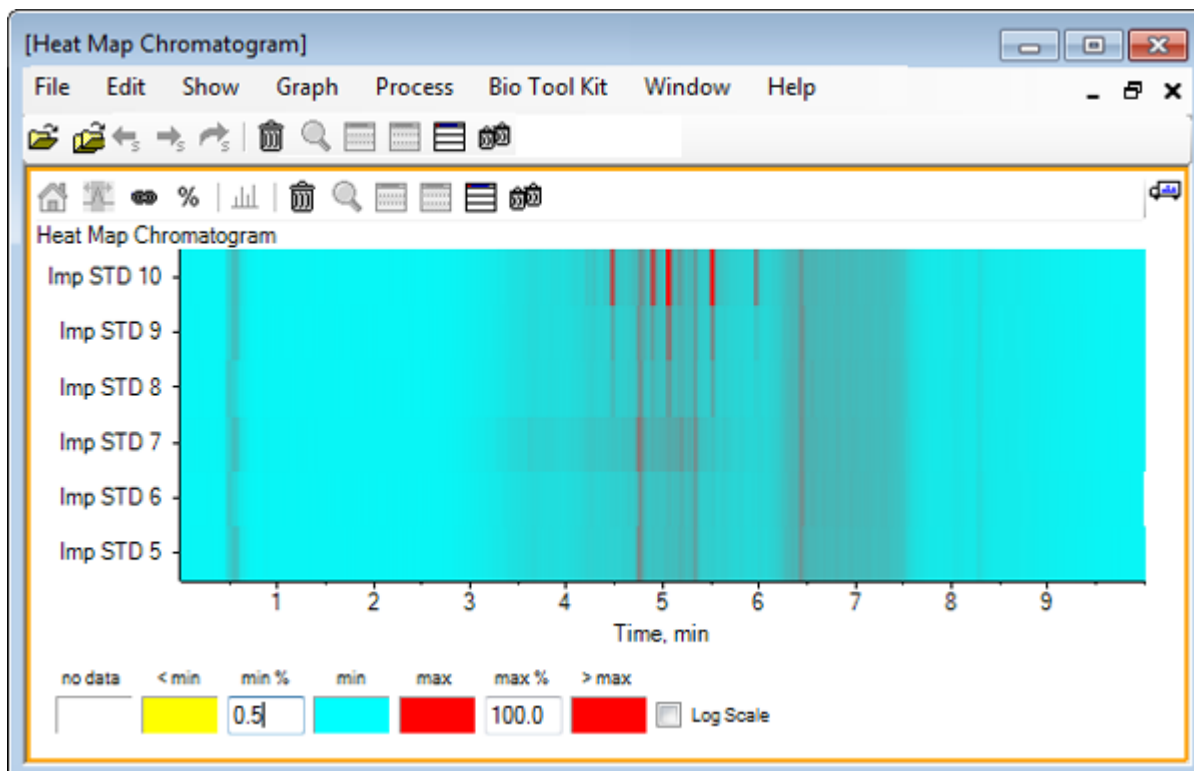
Figura D-17: Mappa di colore con valore min% aumentato a 0,5%



I picchi a bassa intensità possono essere messi in risalto riducendo **max %** in modo tale che la tavolozza dei colori copra un intervallo di intensità minore, ma tutti i picchi maggiori di questo valore hanno lo stesso colore. Questo può essere evidenziato anche selezionando la casella di controllo **Log Scale**. L'attivazione di **Log Scale** richiede un valore diverso da zero di **min %** (ad esempio 1 o 0,1) e quindi mappa i colori al logaritmo dell'intensità percentuale.

Gli strumenti di visualizzazione per più campioni nel software includono la capacità di mostrare TIC, XIC e spettri di più campioni come serie di singole mappe termiche, il che può assistere nel confronto di campioni. La [Figura D-18](#) è per una serie di cromatogrammi TOF di sei analiti. Fare riferimento a [Lavorare con campioni multipli](#).

Figura D-18: Heat Map Chromatogram



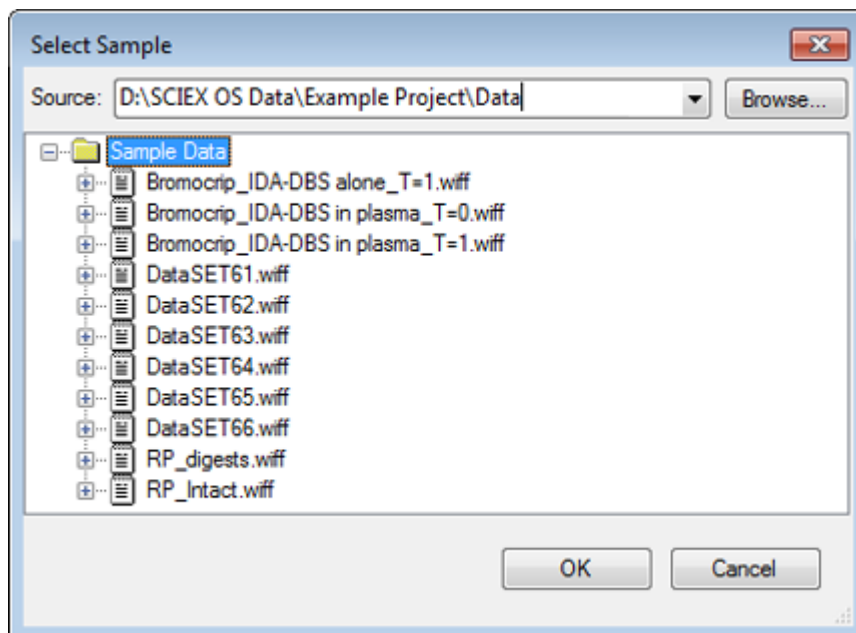
Lavorare con cromatogrammi e spettri

Questa sezione descrive alcune delle più comuni opzioni di elaborazione. Il file utilizzato è un file IDA con una serie di esperimenti con loop, ma in questo esempio viene utilizzato il primo esperimento di indagine che simula una semplice analisi LC/MS. Nella sezione seguente viene esplorata la funzionalità IDA.

Aprire un file di dati

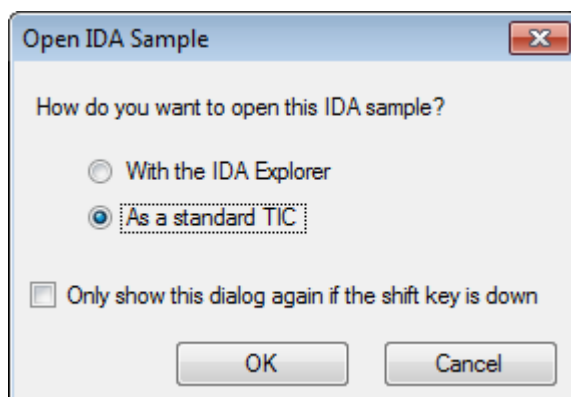
1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale. Si aprirà la finestra di dialogo **Select Sample**.

Figura D-19: Finestra di dialogo Select Sample



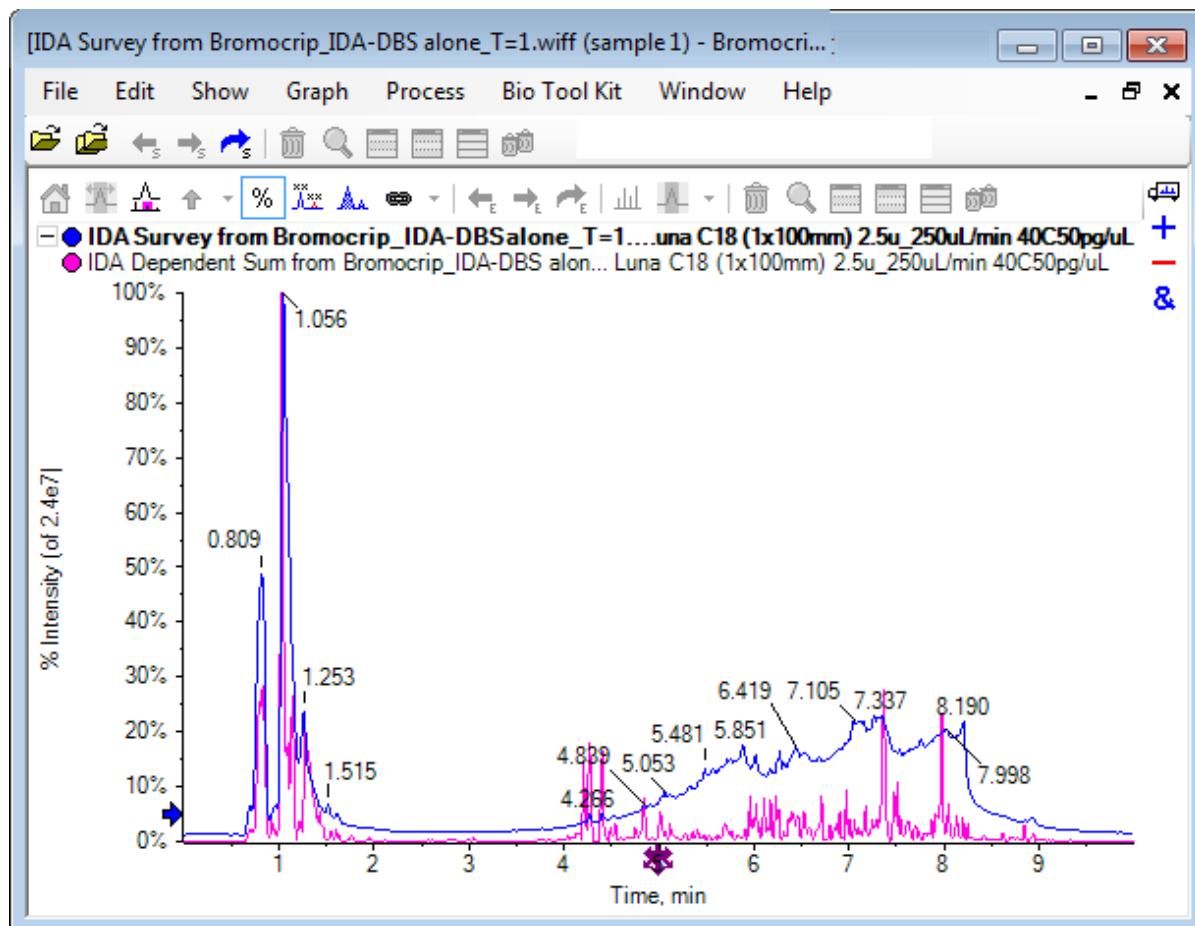
2. Se la cartella **Sample Data** non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**. Per informazioni sui percorsi dei file dati installati, fare riferimento a [Organizzazione](#).
3. Per visualizzare tutti i campioni nel file, fare clic sull'icona a sinistra del file **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff**.
C'è solo un campione nel file **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff**.
4. Selezionare il nome del campione e fare clic su **OK**.
Poiché si tratta di un file IDA, il software suggerisce di specificare come aprire il campione selezionato.

Figura D-20: Open IDA Sample



5. Fare clic su **As a standard TIC** se non è già selezionato e quindi fare clic su **OK** per creare il cromatogramma a corrente ionica totale (TIC) mostrato nella [Figura D-21](#).

Figura D-21: TIC

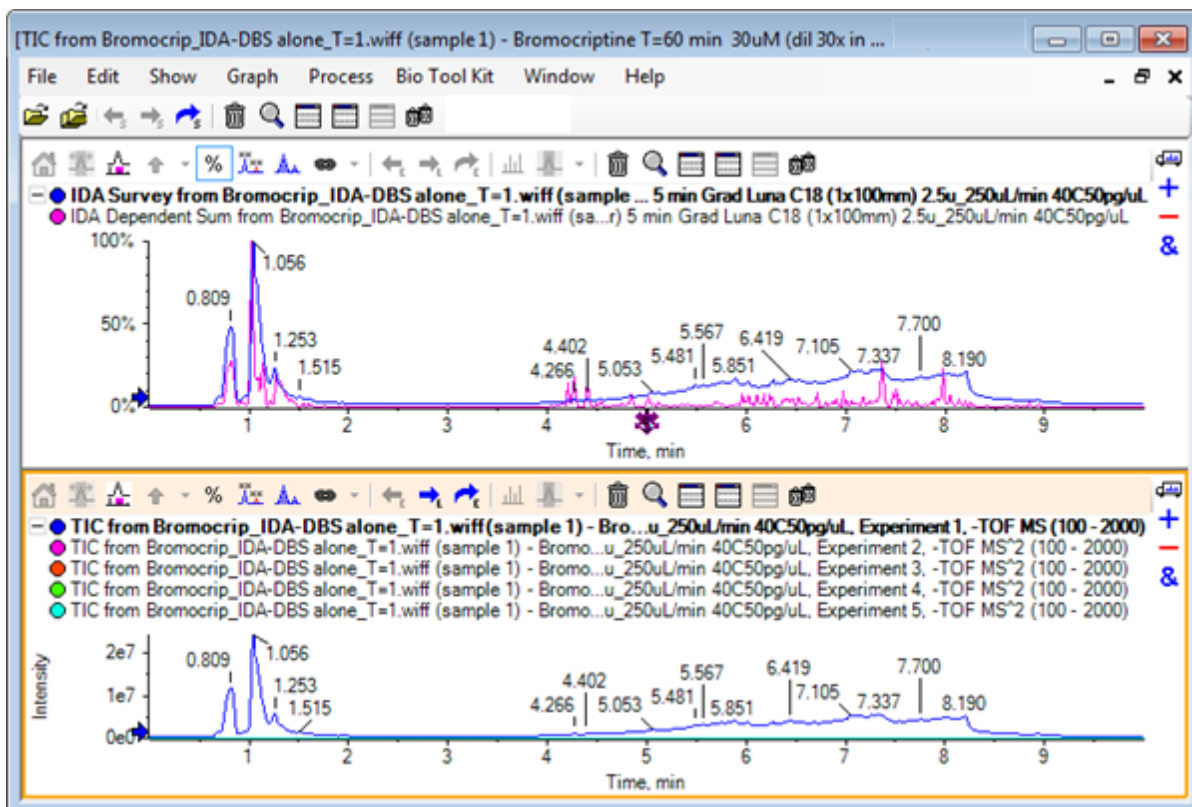


Il riquadro mostra una sovrascrittura della misurazione esaminata con il TIC (blu) e l'altra delle scansioni dipendenti sommate (ione prodotto). In questo caso, vogliamo elaborare i dati dell'indagine per mostrare solo il TIC dell'indagine.

Mostrare il TIC per One Experiment

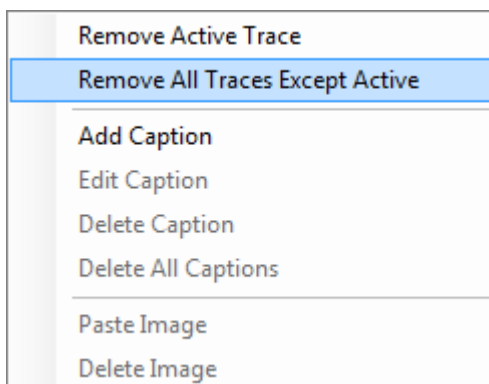
1. Fare doppio clic sull'icona **Fare doppio clic per sovrapporre i singoli TIC per tutti gli esperimenti** al centro dell'asse X per generare TIC sovrapposti per tutti gli esperimenti. Il nuovo cromatogramma è il riquadro attivo. Inoltre, poiché la verifica è il primo esperimento, è la traccia attiva come indicato dal titolo in grassetto nell'intestazione.

Figura D-22: TIC sovrapposti



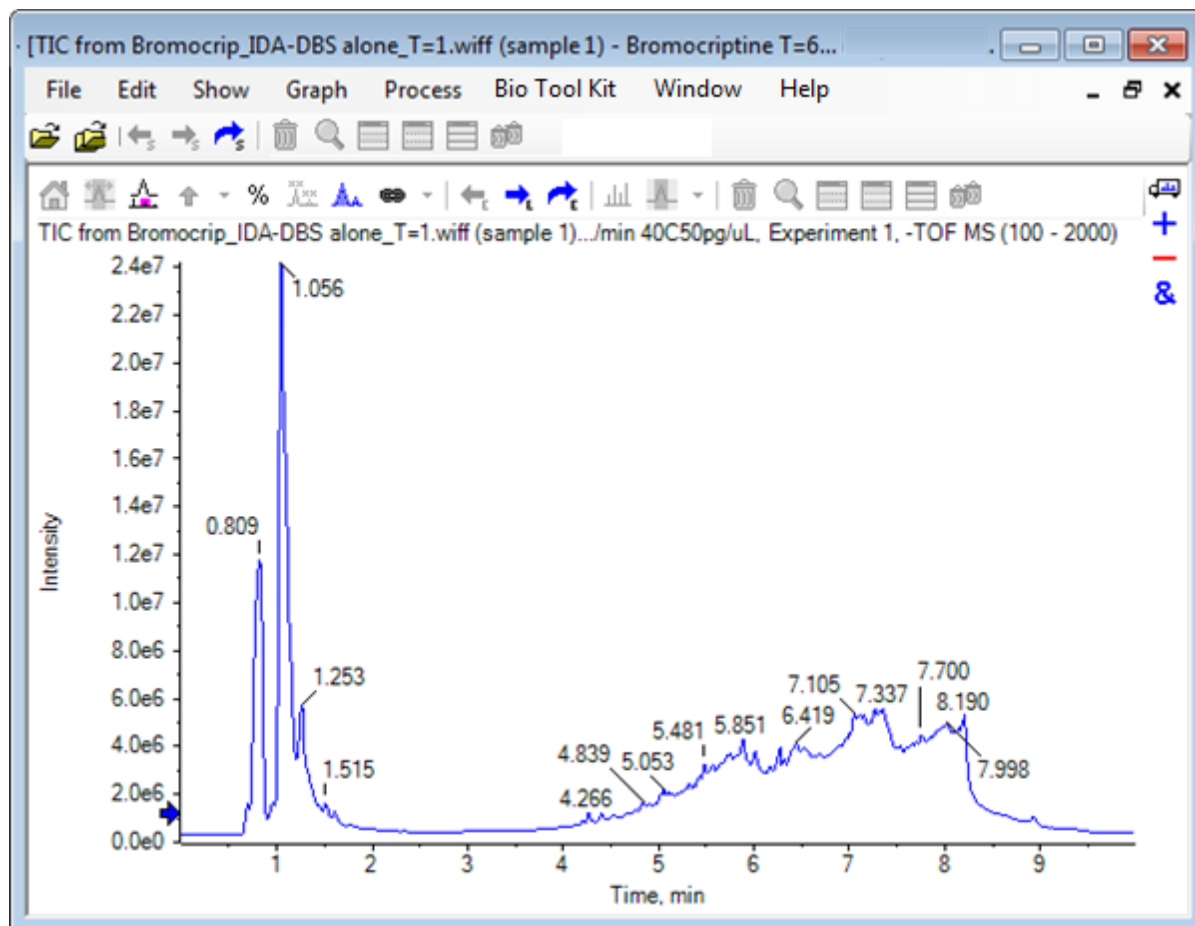
2. Fare clic con il pulsante destro del mouse all'interno del riquadro del cromatogramma attivo e quindi fare clic su **Remove All Traces Except Active** in modo tale che resti solo il TIC della verifica.

Figura D-23: Menu pulsante destro del mouse



3. Nello stesso riquadro, fare clic sull'icona **Elimina tutti gli altri riquadri** per lasciare solo il TIC dell'analisi.

Figura D-24: TIC dell'analisi



Mostrare un XIC per una formula molecolare nota

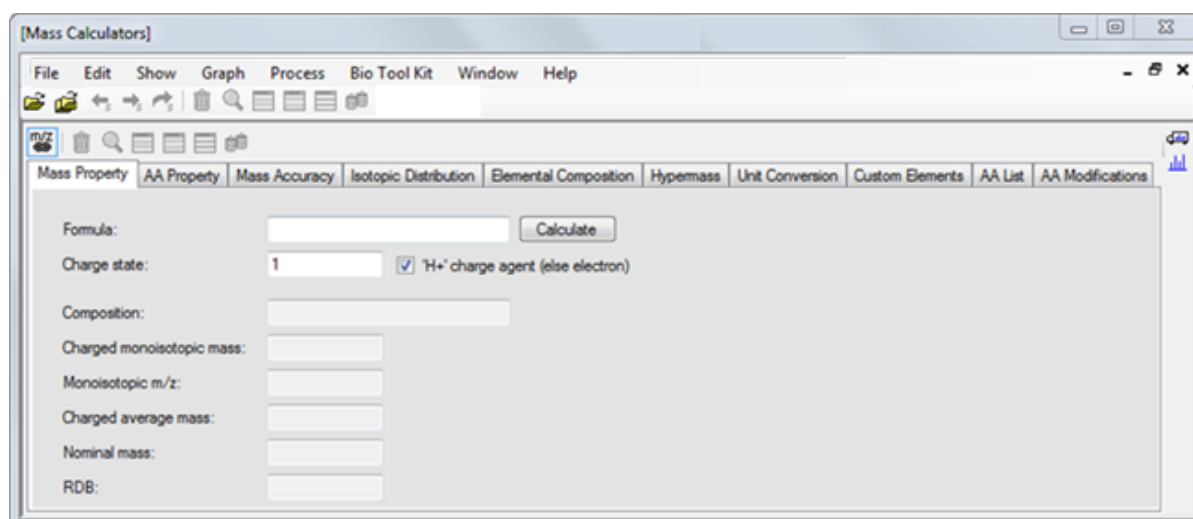
Mentre alcuni picchi apparentemente piccoli sono ovvi nell'intervallo da 4 min e 7 min, è possibile che molti siano oscurati dal segnale di fondo che è piuttosto intenso in questi dati. Poiché questo campione corrisponde a un'incubazione microsomiale di bromocriptina, utilizzare il rapporto m/z dello ione molecolare previsto come guida iniziale alla posizione del picco. La formula molecolare della bromocriptina è $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$ e poiché questi sono dati in modalità negativa ci aspettiamo di vedere uno ione $(M - H)^-$.

1. Fare clic su **Show > Mass Calculators**.
2. Fare clic sulla scheda **Mass Property** nel riquadro **Mass Calculators**.
3. Digitare la formula molecolare nel campo **Formula**.
4. Digitare **-1** nel campo **Charge state**.
5. Selezionare **'H+' charge agent (else electron)**.
6. Fare clic su **Calculate**.

Nota: È anche possibile rimuovere manualmente un idrogeno dalla formula molecolare e non selezionare la casella di controllo 'H+' charge agent (else electron).

La finestra di dialogo si aggiorna per mostrare un numero di valori di massa: monoisotopici, valore medio, e così via.

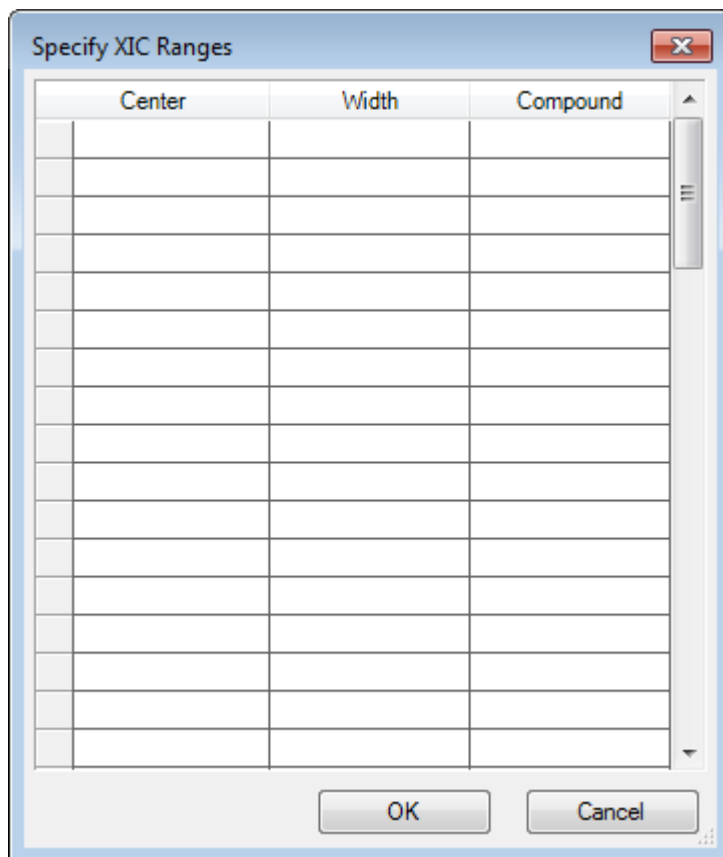
Figura D-25: Riquadro Mass Calculators



Nota: A questi valori di massa, gli isotopi sono facilmente risolti. Per questo motivo, il valore m/z monoisotopico è il valore più appropriato.

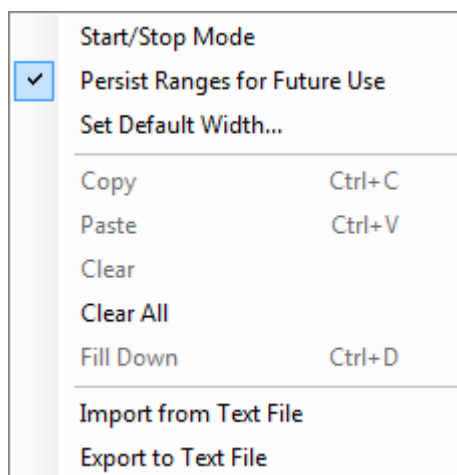
7. Selezionare il valore **Monoisotopic m/z** e quindi premere **Ctrl+C** per copiare il valore negli appunti.
8. Fare clic sull'icona **Elimina questo riquadro** per eliminare il riquadro **Mass Calculators** o fare clic sull'icona **Nasconde questo riquadro** per nascondere il riquadro.
9. Fare clic su **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)** per aprire la finestra di dialogo **Specify XIC Ranges**.

Figura D-26: Finestra di dialogo Specify XIC Ranges



10. Fare clic con il pulsante destro del mouse nella finestra di dialogo **Specify XIC Ranges** per aprire il menu contestuale.
11. Nel menu contestuale, eseguire quanto segue:
 - a. Accertarsi che l'opzione **Start/Stop Mode** non sia selezionata, in modo che i valori XIC siano inseriti come valore centrale e una larghezza.
 - b. Fare clic su **Set Default Width**, digitare **0.05**, quindi fare clic su **OK**.
 - c. Fare clic su **Persist Ranges for Future Use** in modo che i valori siano ricordati la volta successiva che la finestra di dialogo è utilizzata.

Figura D-27: Menu contestuale

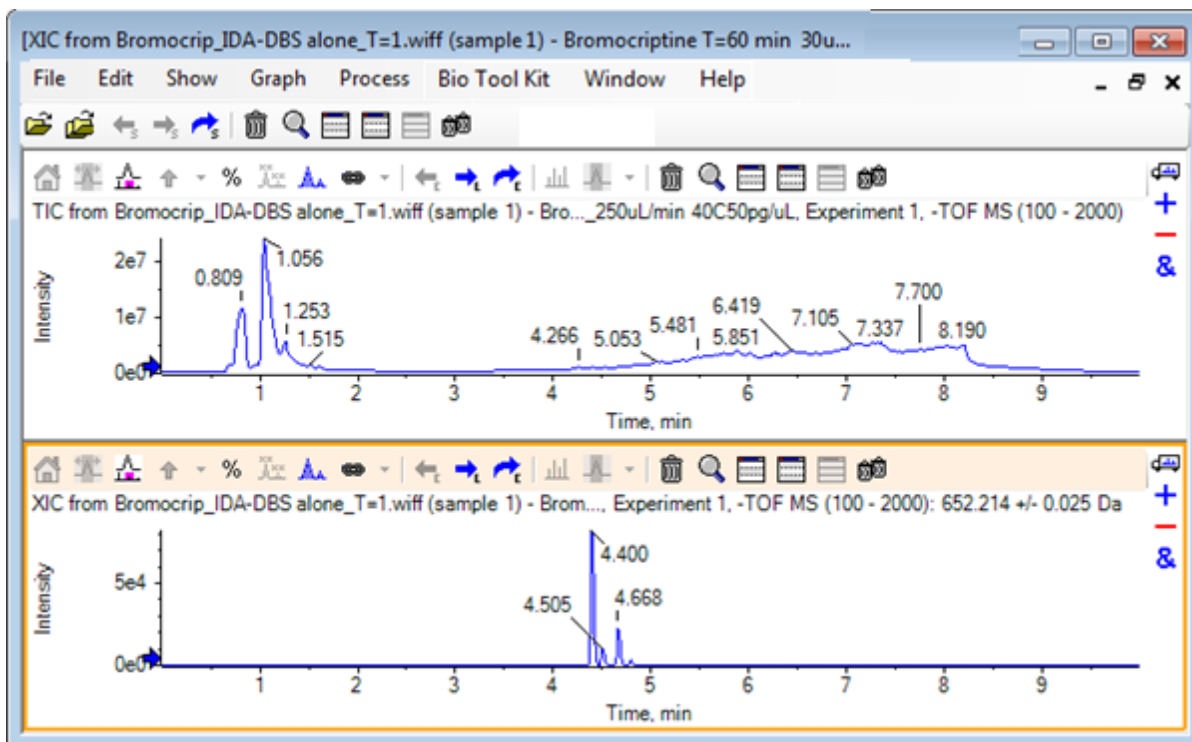


12. Ritornare alla finestra di dialogo **Specify XIC Ranges**.
La finestra di dialogo è ora impostata in modo che debba essere digitata solo una massa per ciascun XIC di interesse e si utilizzi una larghezza predefinita.
13. Selezionare la prima cella sotto **Center** e quindi premere **Ctrl+V** per incollare il valore della massa dal passaggio 7.
14. Fare clic su **OK**.

Nota: Poiché è stata impostata una larghezza predefinita, non è necessario digitare un valore individuale.

Il riquadro ora contiene il TIC e il XIC per lo ione molecolare atteso della bromocriptina, che mostra diversi picchi.

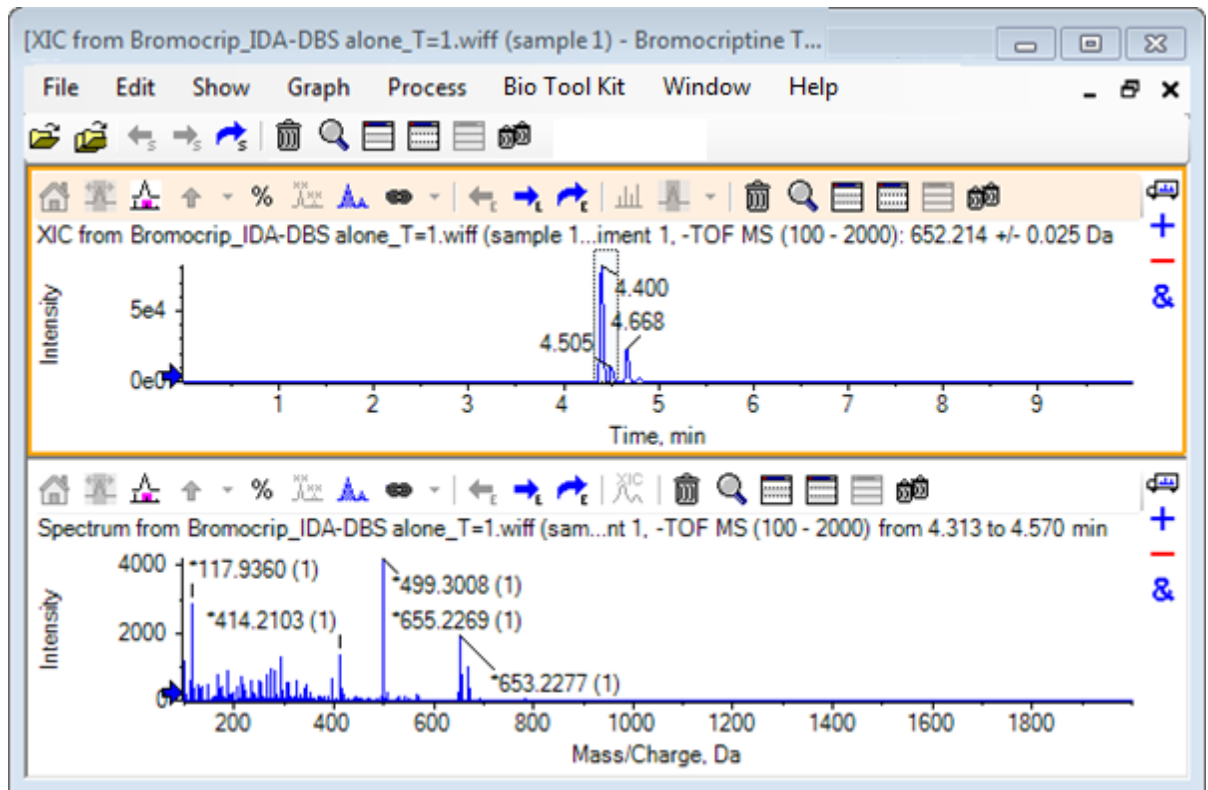
Figura D-28: TIC e XIC per lo ione molecolare previsto di bromocriptina



Creare e interagire con uno spettro

1. Nascondere il riquadro TIC, effettuare una selezione intorno al picco più alto nel XIC (Cromatogramma a ioni estratti) e quindi fare clic sull'icona **Visualizza uno spettro per la selezione** per generare lo spettro medio per questa area.

Figura D-29: Spettro dal picco più alto nel XIC



Nota: In Figura D-29, il campo **Label** nella scheda **Peak Labeling & Finding** della finestra di dialogo **Options** (disponibile attraverso **Edit > Options**) è impostata su **Mass (Charge)**.

- Trascinare l'asse x da circa 630 Da a 700 Da per ingrandire lo spettro di questa area.

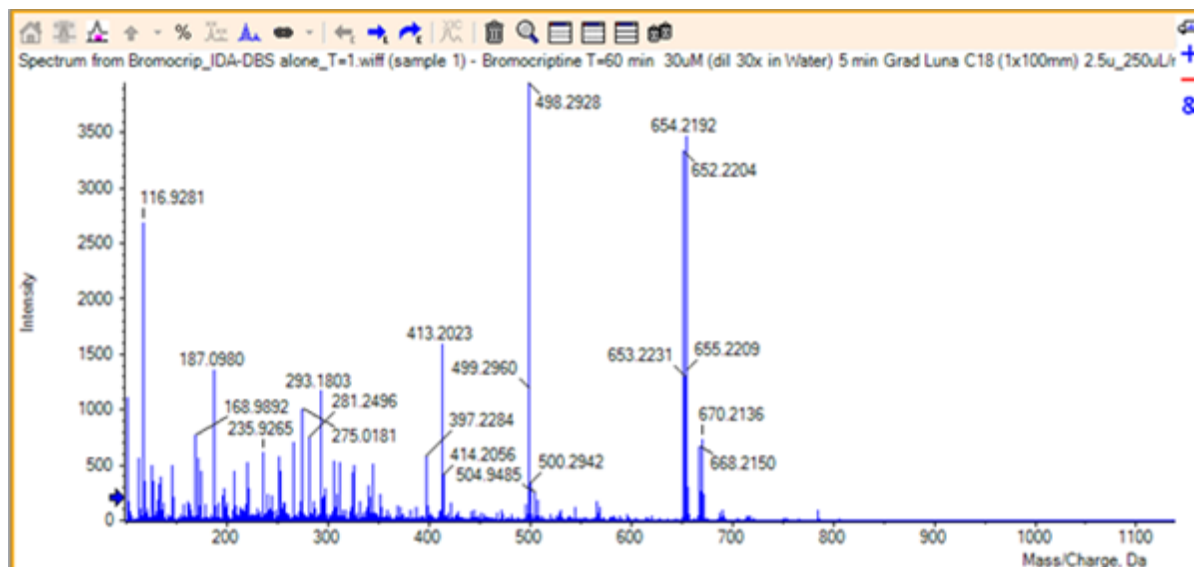
Nota: Potrebbe essere necessario effettuare tale procedimento in due fasi.

C'è un picco a 652.2199, molto vicino al valore atteso di 652.2140, il quale mostra anche un modello di isotopo di bromo, ma c'è un secondo cluster di isotopo di bromo a partire da 668.2158. Il rapporto esatto dei valori m/z differisce a seconda della finestra di tempo di ritenzione esatto selezionata nel XIC.

Nota: Lo stile di etichettatura utilizzato qui mostra un rapporto m/z e una stima dello stato di carica tra parentesi (basato sulla distanza tra i picchi). I picchi che sembrano essere monoisotopici sono anche contrassegnati con un asterisco. L'algoritmo di etichettatura non è a conoscenza di isotopi diversi da ^{13}C e quindi etichetta l'isotopo ^{81}Br come caricato singolarmente, ma lo contrassegna erroneamente come monoisotopico.

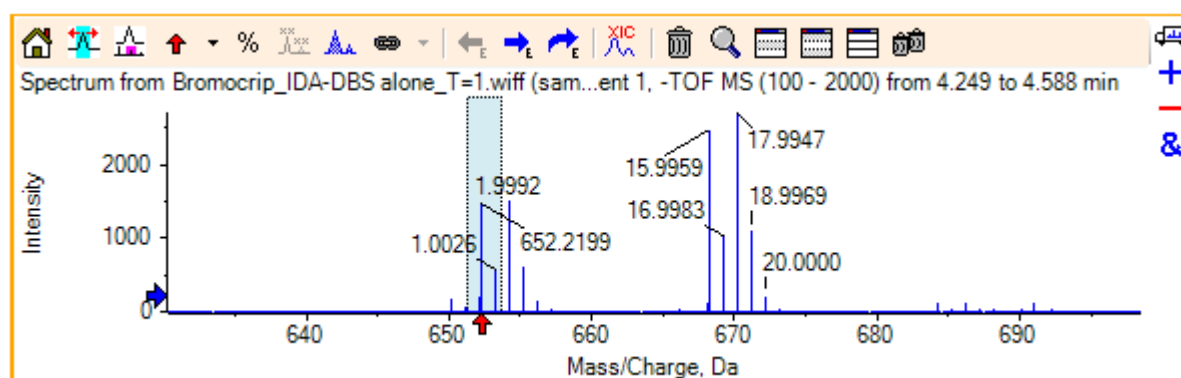
- Modificare lo stile di etichettatura allo stile predefinito facendo clic su **Edit > Options**, accedere alla scheda **Peak Labeling & Finding** e quindi modificare l'impostazione a **Mass / Charge** nel campo **Label**.
- Fare clic su **OK**.

Figura D-30: Spettro con stile diverso di etichettatura



5. Nello spettro ingrandito, effettuare una selezione intorno al picco a 652.2199 e quindi fare clic sull'icona **Aggiunge i marcatori a freccia ai picchi selezionati**.

Figura D-31: Mostrare uno spettro  sul picco selezionato



L'etichettatura della massa è ora relativa al picco selezionato, così vengono illustrate le differenze tra i picchi di massa. L'etichetta per il picco a 668.2158 riporta ora 15.9959, corrispondente alla massa di ossigeno, e suggerisce che questo picco è il metabolita idrossi-bromocriptina.

Suggerimento! Le frecce possono essere spostate trascinandole in un altro picco e rimuovendole selezionando **Remove All Arrows** dall'elenco accanto all'icona della freccia.

6. Effettuare una selezione intorno al picco etichettato 15.9959 e poi fare clic sull'icona **Visualizza un XIC per la selezione**.
7. Nella finestra di dialogo **XIC Selection Ranges**, fare clic su **OK**.

Figura D-32: Finestra di dialogo XIC Selection Ranges

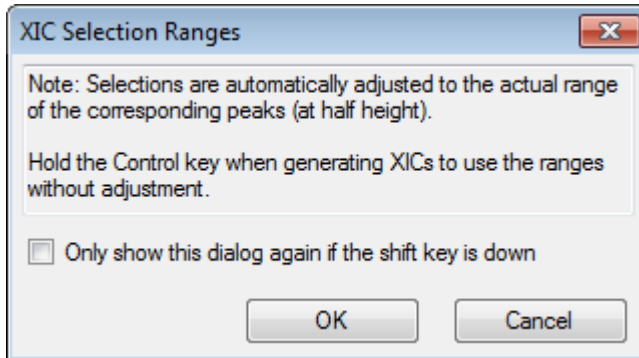
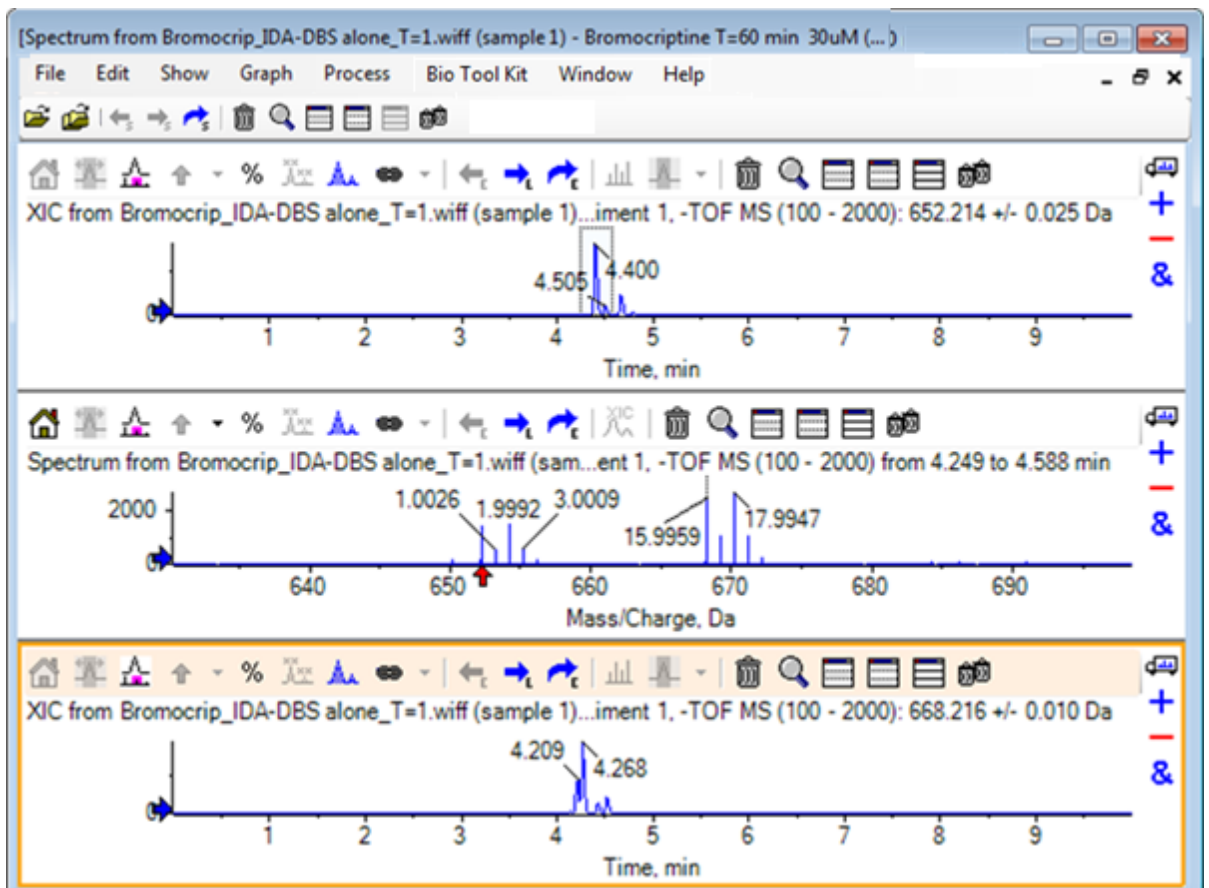


Figura D-33: XIC



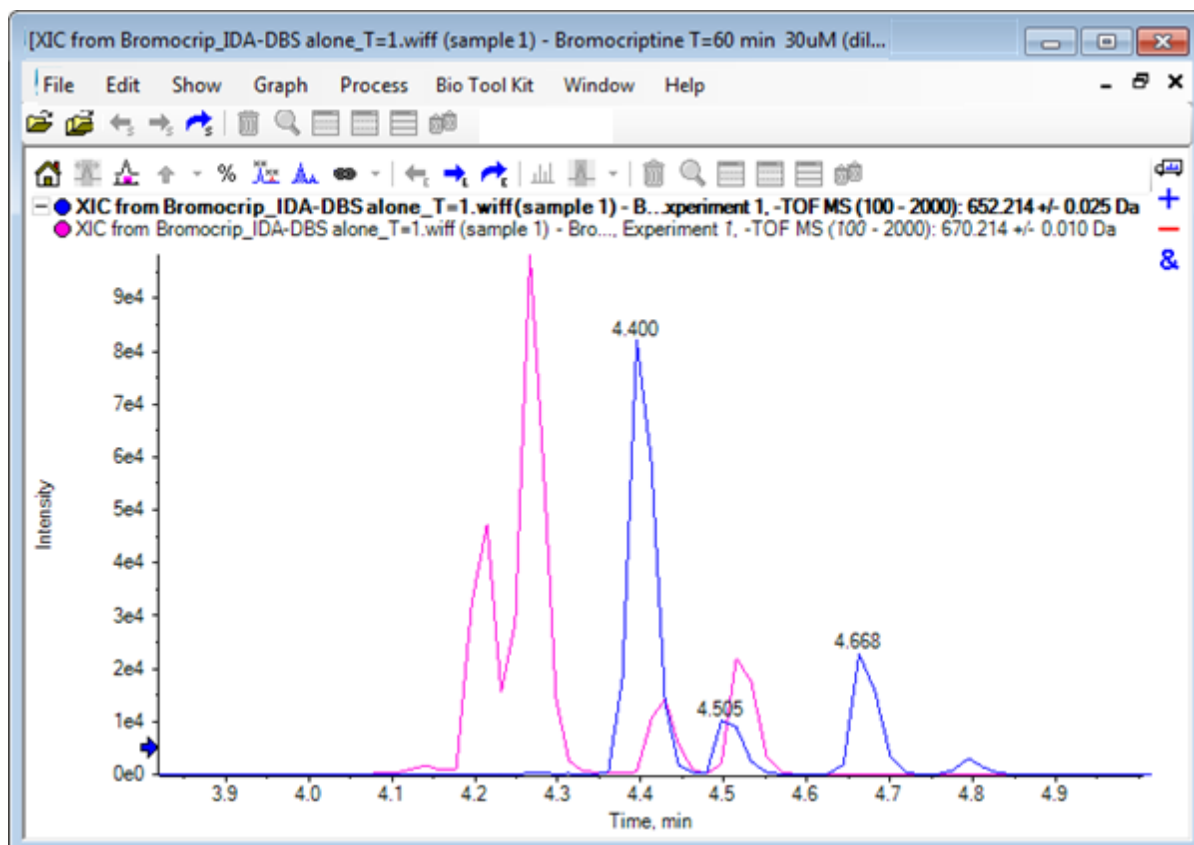
È una soluzione utile per creare in modo interattivo XIC. Come impostazione predefinita, la larghezza utilizzata per il XIC è la larghezza del picco di massa a metà altezza e viene visualizzato un collegamento di selezione nello spettro.

8. Trascinare il collegamento di selezione per aggiornare il XIC visualizzato e aggiungerne un altro ripetendo il passaggio.

Esercitazione per Explorer

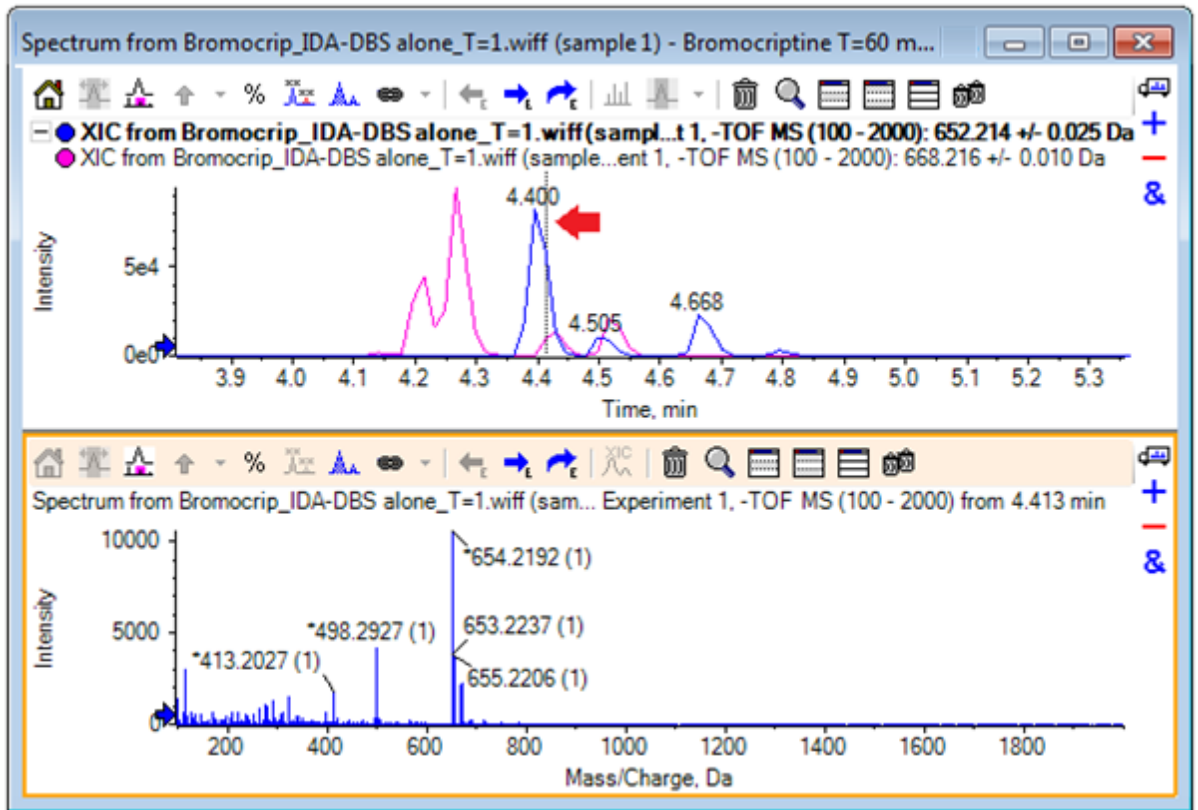
9. Fare clic sull'icona **Trascinare in un altro grafico per sovrapporre i dati attivi nel grafico di destinazione** in questo nuovo cromatogramma e quindi trascinare il cromatogramma nel riquadro XIC originale in modo che vengano sovrapposti.

Figura D-34: XIC sovrapposti



10. Nascondere o eliminare il secondo riquadro del cromatogramma e lo spettro e poi ingrandire i cromatogrammi sovrapposti per visualizzare l'area intorno a 4 min fino a 5 min.
Esistono due picchi a circa 4,4 min, uno da ogni XIC, che eluiscono circa allo stesso tempo di ritenzione, ma non esattamente. Esistono anche alcuni picchi nel cromatogramma 668.216 che indicano presumibilmente la presenza di altri metaboliti idrossilati.
11. Fare doppio clic nel riquadro del cromatogramma a 4,40 min per creare lo spettro da una singola scansione.

Figura D-35: Spettro da una singola scansione



Una linea tratteggiata nel XIC indica la scansione visualizzata (indicata con una freccia nella Figura D-35). Se la linea viene trascinata, lo spettro si aggiorna in modo tale da potere esplorare l'area intorno a 4,40 min. Utilizzare i tasti freccia in avanti e indietro per spostarsi di una scansione alla volta. È possibile acquisire uno spettro pulito del picco per il rapporto m/z di 652.214 spostando la linea in un'area dove il segnale per lo ione 668.215 è zero (sebbene anche qui il fondo sia abbastanza alto), ma non può essere ottenuto in questo modo uno spettro pulito per quest'ultimo.

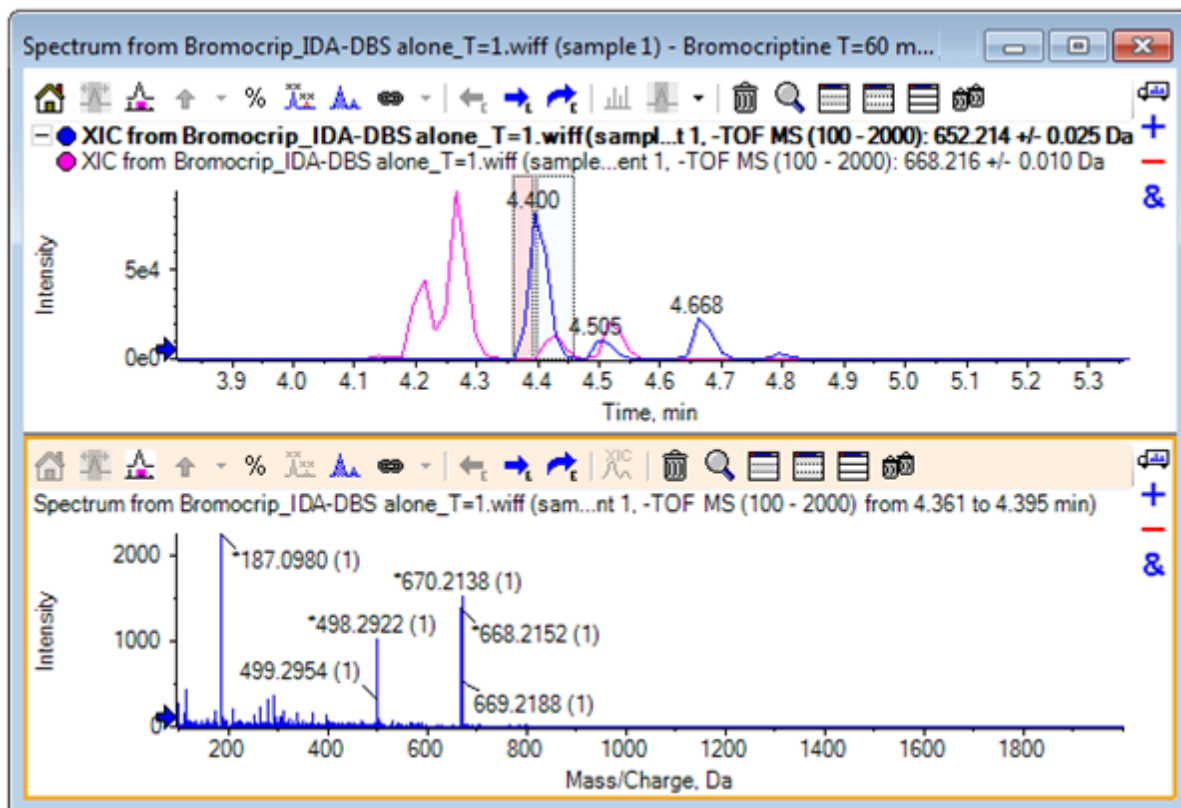
12. Eliminare il riquadro dello spettro.
13. Nel riquadro del cromatogramma, effettuare una selezione ristretta che comprenda il lato sinistro del picco 652, ma che eviti il picco 668, e fare clic sull'icona **Impostare l'intervallo di sottrazione del fondo**.

La selezione diventa rosa.

Quando un intervallo di sottrazione è stato definito, viene automaticamente sottratto da qualsiasi spettro creato successivamente. L'intervallo può essere cancellato selezionando **Clear Subtraction Range** dalla lista a cui si accede tramite la freccia piccola a destra dell'icona **Imposta intervallo di sottrazione**.

14. Effettuare un'altra selezione nel cromatogramma che includa l'apice del picco 668, ma il meno possibile del picco 652 e fare clic sull'icona **Visualizza uno spettro per la selezione**.

Figura D-36: Spettro con fondo sottratto per il picco 668



Il risultato è uno spettro col fondo sottratto per il picco 668 che contiene una piccola parte del picco 652. Entrambe le selezioni nel cromatogramma rimangono collegate ai rispettivi spettri, anche se il fondo non è visibile, e possono essere spostate in altre parti del cromatogramma. Spostando la selezione dello spettro, si aggiorna automaticamente lo spettro visualizzato, ma se l'area di fondo viene modificata, questo sarà applicato solo agli spettri creati successivamente.

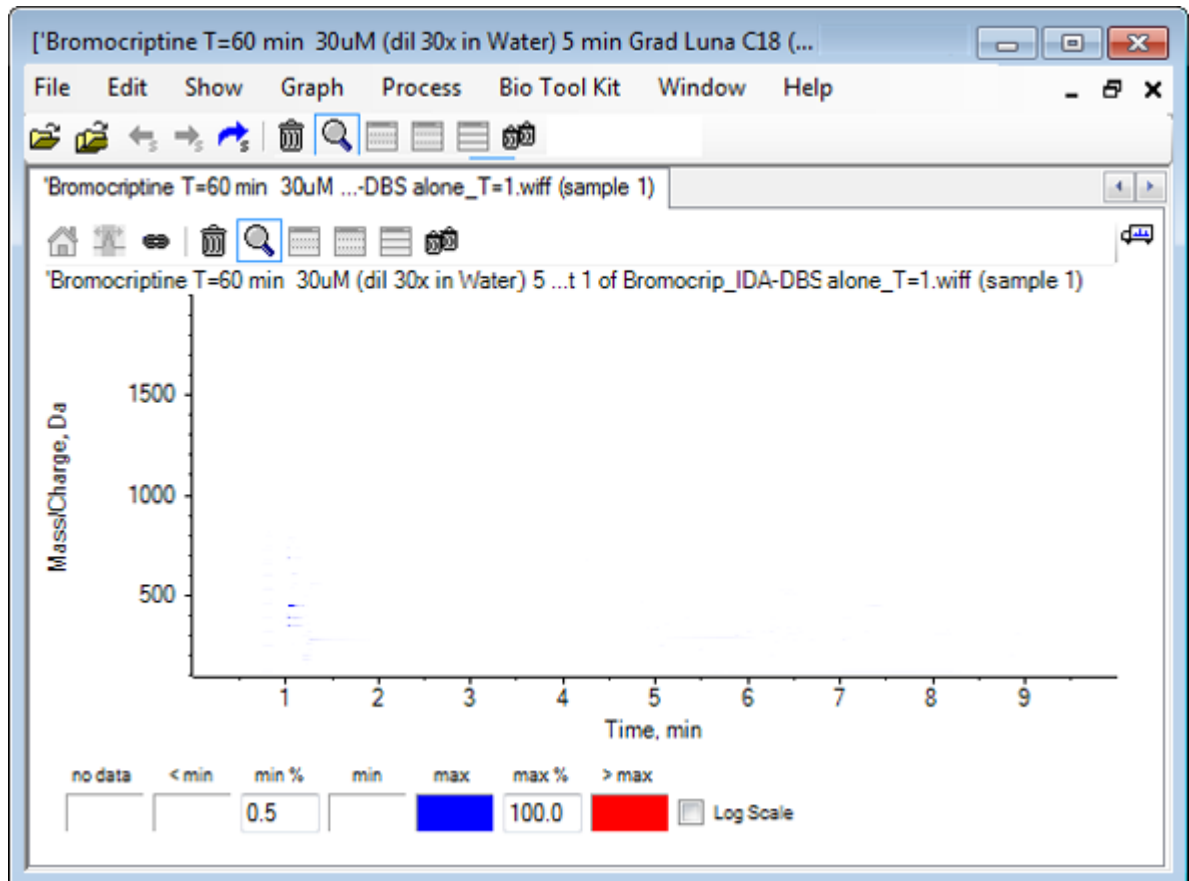
15. Fare clic sull'icona **Nasconde tutti gli altri riquadri**, fare clic sullo spettro singolo TIC e quindi fare clic sull'icona **Elimina tutti gli altri riquadri** per mostrare solo il TIC.
16. Se il riquadro TIC è stato eliminato, fare clic su **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**, selezionare **Period 1, Experiment 1** e poi fare clic su **OK**.

Utilizzo di un Contour Plot

Un'alternativa alla visualizzazione di parti di un set di dati (cromatogrammi o spettri) è di utilizzare un Contour Plot per ottenere una panoramica completa di un esperimento. I Contour Plot possono essere molto informativi, ma di solito è necessario adattare i parametri di visualizzazione per ottenere i risultati migliori. In questo caso, il composto precursore è brominato e il Contour Plot fornisce un modo di localizzare i picchi con lo schema di isotopi del bromo.

1. Col TIC di esperimento singolo attivo, fare clic su **Show > LC/MS Contour Pane**, e quindi fare clic sull'icona **Espande il riquadro attivo per riempire la finestra** nella barra degli strumenti del Contour Plot risultante in modo che sia l'unico riquadro visibile.

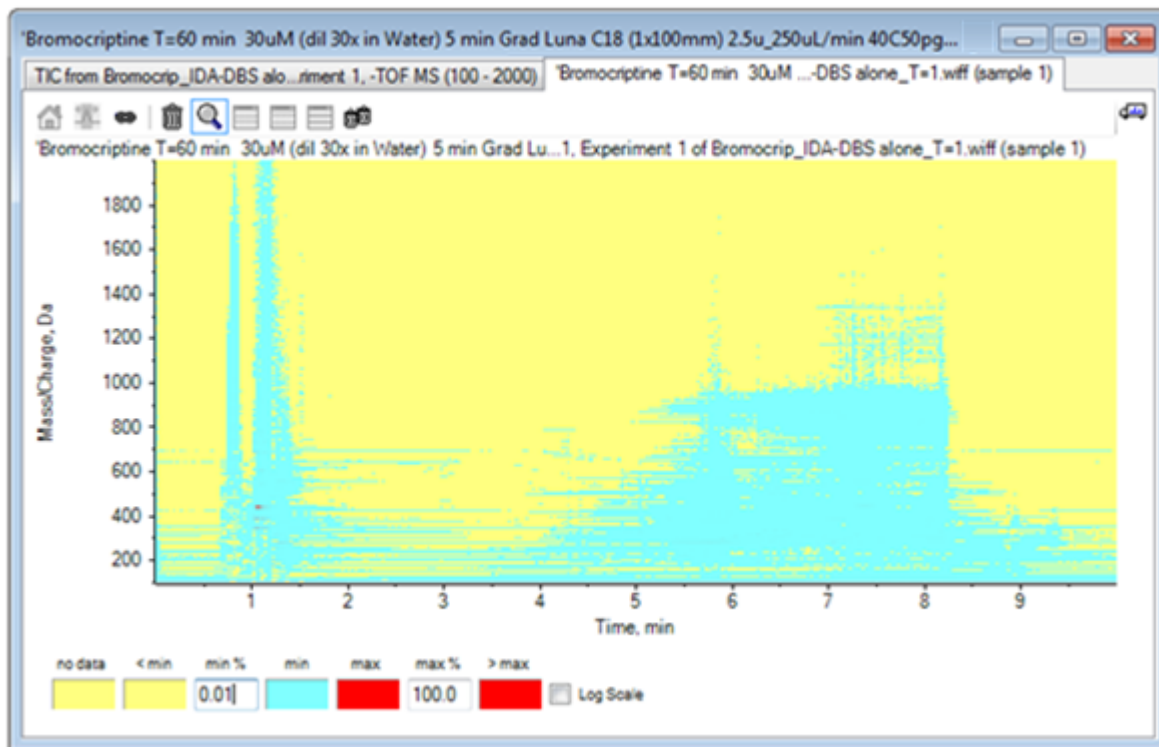
- Se i controlli di aspetto (caselle di colore nell'angolo inferiore sinistro) non sono visibili, fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro e fare clic su **Show Appearance Control**. Fare riferimento a [Contour Plot e mappe termiche](#) e alla *Guida di riferimento*.

Figura D-37: Contour Plot

Suggerimento! Con i parametri predefiniti, la visualizzazione non è molto utile in quanto è dominata da picchi di basso livello e rumore che oscurano i picchi reali. È possibile generare una visualizzazione migliore in questo modo:

- Modificando l'intensità minima da mostrare. Ciò modifica tutti i punti dati sotto questo livello per disegnarli nello stesso colore dei punti in cui non esistono dati; in altri termini, diventano invisibili.
 - Modificando la mappatura dei colori in modo tale che i colori disponibili coprano un intervallo di intensità più stretto che migliora la visibilità di piccoli picchi.
- Modificare il valore **min %** a **0.01**. Ciò causa la scomparsa di tutti i punti dati con intensità minori di 0,01% del picco base.

Figura D-38: Contour Plot

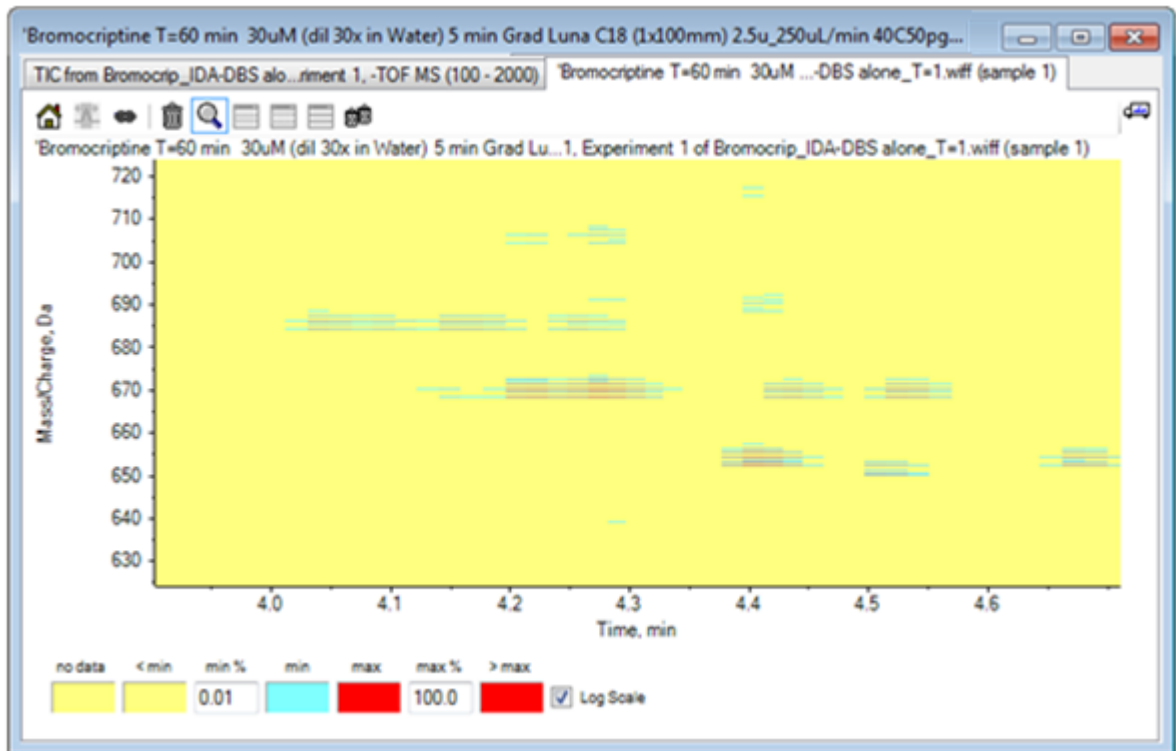


È mostrata una parte molto maggiore della struttura dei dati. Il volume vuoto e l'area di lavaggio della colonna sono trasparenti, ed esistono alcuni picchi di fondo che sono presenti in tutti i tempi di ritenzione e che sono mostrati come linee orizzontali.

4. Selezionare la casella di controllo **Log scale**.
I colori selezionati sono mappati al logaritmo dell'intensità (in percentuale dell'intensità del picco di base) che ha l'effetto di aumentare i picchi di intensità minore, ad esempio il cluster attorno a 4 min fino a 4,5 min con masse nell'intervallo da 600 a 700.
5. Selezionare questa regione e quindi fare clic sull'icona **Esegue l'ingrandimento della selezione a visualizzazione a schermo intero**.

Suggerimento! È anche possibile ingrandire gli assi x e y indipendentemente nella maniera consueta.

Figura D-39: Contour Plot



La visualizzazione ora mostra che in questa regione esistono alcuni picchi brominati che è possibile distinguere per i set di quattro linee parallele che corrispondono agli isotopi ^{79}Br e ^{81}Br e ai relativi isotopi ^{13}C .

6. Sperimentare con le impostazioni di controllo dei colori e osservare gli effetti sulla visualizzazione.
7. Al termine, chiudere la finestra.
Ciò chiude anche il file dei dati.

Riepilogo

In questa sezione sono state trattate le seguenti attività:

- Sfolgiare e aprire un file di dati per mostrare un TIC.
- Modifica della visualizzazione in modo che sia utilizzato un solo esperimento.
- Utilizzo del calcolatore di massa per determinare la massa di uno ione da una composizione elementare e utilizzo della massa per generare un XIC.
- Generazione interattiva di spettri e cromatogrammi e utilizzo di marcatori a freccia su spettri per mostrare la differenza di massa tra picchi.
- Generazione di spettri sottratti dal fondo.
- Utilizzo di un Contour Plot per generare una panoramica di un set di dati.

Queste operazioni sono la base di tutta l'elaborazione dei dati interattivi, indipendentemente dal tipo di dati mostrato.

Lavorare con IDA Explorer

In un esperimento IDA, i dati degli spettri MS/MS (e forse MS3) sono raccolti automaticamente quando i dati in uno o più spettri di analisi soddisfano determinati criteri. È comune impostare i parametri in modo da evitare di raccogliere più spettri dallo stesso picco LC escludendo la massa precursore (non consentendole di agire come trigger) per un determinato periodo di tempo. Occasionalmente, è possibile raccogliere spettri ridondanti. Inoltre, poiché IDA è attivato non appena un picco soddisfa i criteri, genera tipicamente uno spettro all'inizio nel picco LC e ciò potrebbe non avere la qualità ottimale.

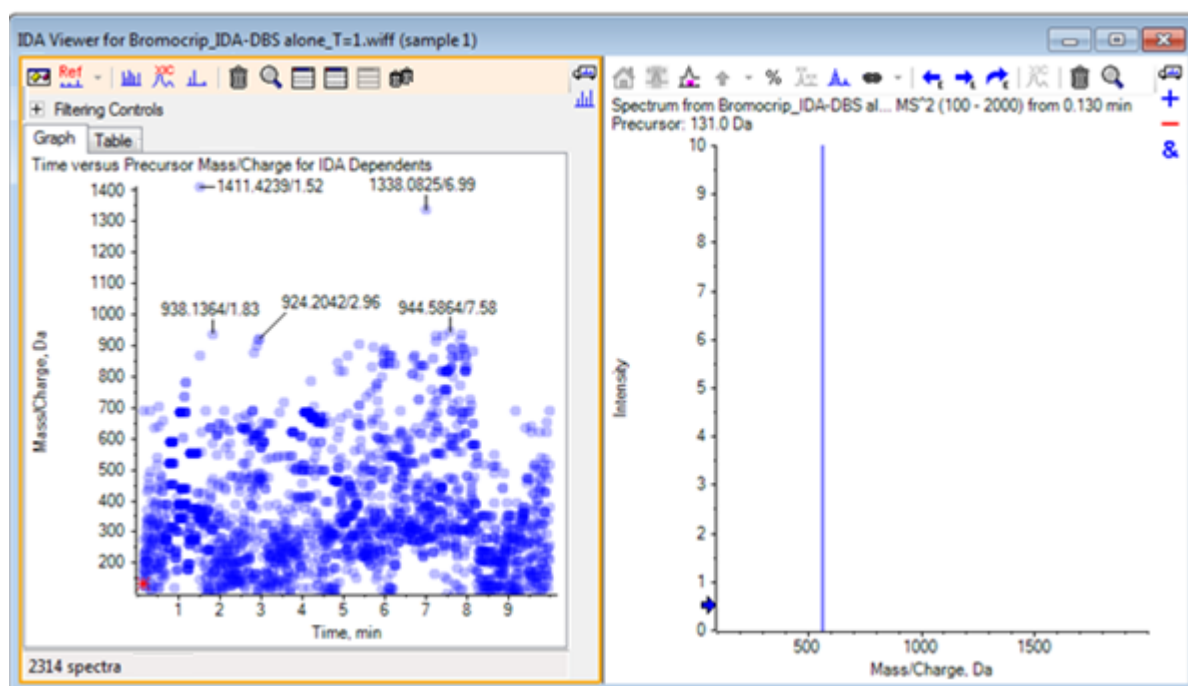
Il software contiene strumenti per mostrare, filtrare ed elaborare dati IDA. Alcuni di questi sono esplorati in questa sezione.

Chiudere eventuali finestre aperte prima di iniziare.

Mostrare e unire spettri

1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale. Si aprirà la finestra di dialogo **Select Sample**.
 2. Se la cartella **Sample Data** non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**.
 3. Selezionare il file **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff** e quindi fare clic su **OK**.
 4. Nella finestra di dialogo **Open IDA Sample**, fare clic su **With the IDA Explorer** e quindi fare clic su **OK**.
- Il programma esamina tutti gli spettri nel file di dati e quindi genera il grafico seguente.

Figura D-40: Visualizzatore IDA



Il pannello di sinistra contiene una scheda **Graph** e una scheda **Table**. La scheda **Graph** mostra una rappresentazione virtuale del Contour Plot in cui ogni punto dati rappresenta il tempo di ritenzione e il rapporto m/z di uno ione che è stato selezionato come ione precursore. La scheda **Table** mostra una visualizzazione tabellare dei punti dati nel Contour Plot virtuale. Il pannello destro mostra lo spettro per i punti dati selezionati. Inizialmente è mostrato il primo spettro MS/MS.

Il Contour Plot utilizza l'intensità di colore per rispecchiare l'intensità di picco. Colori più scuri indicano picchi più intensi. Le etichette sono disegnate laddove possibile, accertandosi che non si sovrappongano a punti dati o a vicenda. Ingrandire il Contour Plot per esaminare un'area con maggiori dettagli e mostrare più etichette.

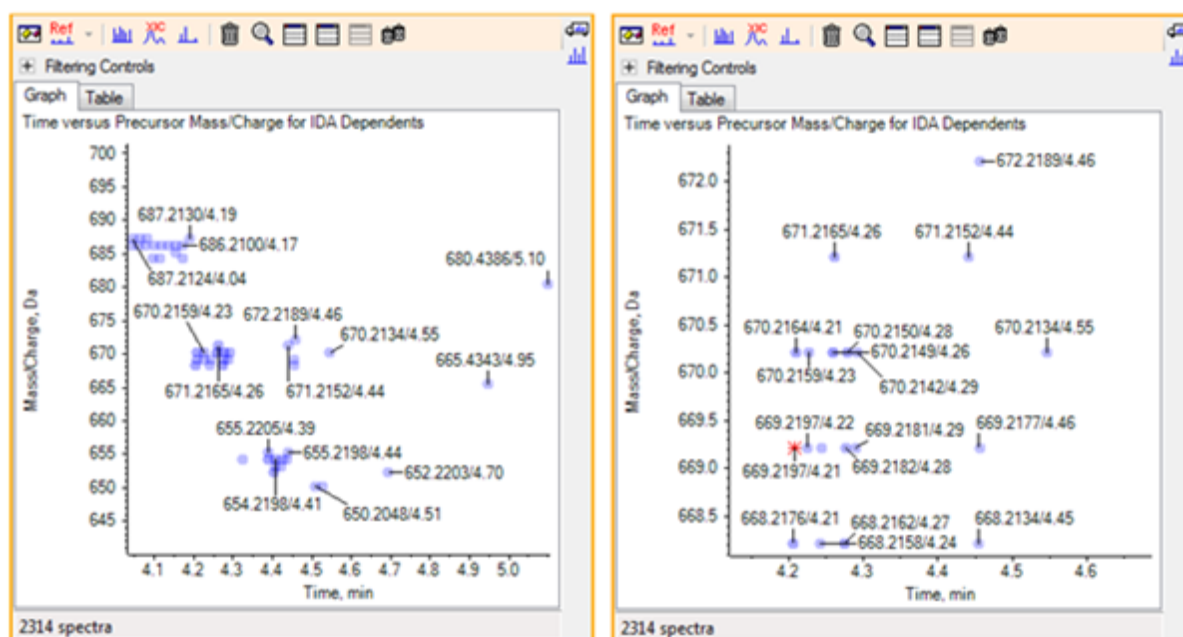
5. Nel pannello a sinistra, ingrandire la regione da 4 min a 5 min e da 640 Da a 700 Da in cui sono stati precedentemente trovati i picchi correlati alla bromocriptina.

La figura a sinistra ([Figura D-41](#)) mostra solo il pannello sinistro. Se la visualizzazione attuale è diversa, fare clic sull'icona **Mostra opzioni** e cancellare la casella di controllo **Merge spectra with similar precursor masses** nella scheda **General** della finestra di dialogo **Options**.

Un grande numero di spettri MS/MS è stato raccolto in questa regione e, sebbene i picchi cromatografici siano molto stretti, diversi di questi sono probabilmente dagli stessi picchi. Inoltre, per ciascun picco nel cluster di isotopo sono stati raccolti degli spettri MS/MS.

6. Ingrandire ulteriormente il grafico per concentrarsi sul cluster di picchi a un rapporto m/z di 668 Da - 672 Da. Fare riferimento al pannello di destra nella [Figura D-41](#).

Figura D-41: Visualizzatore IDA

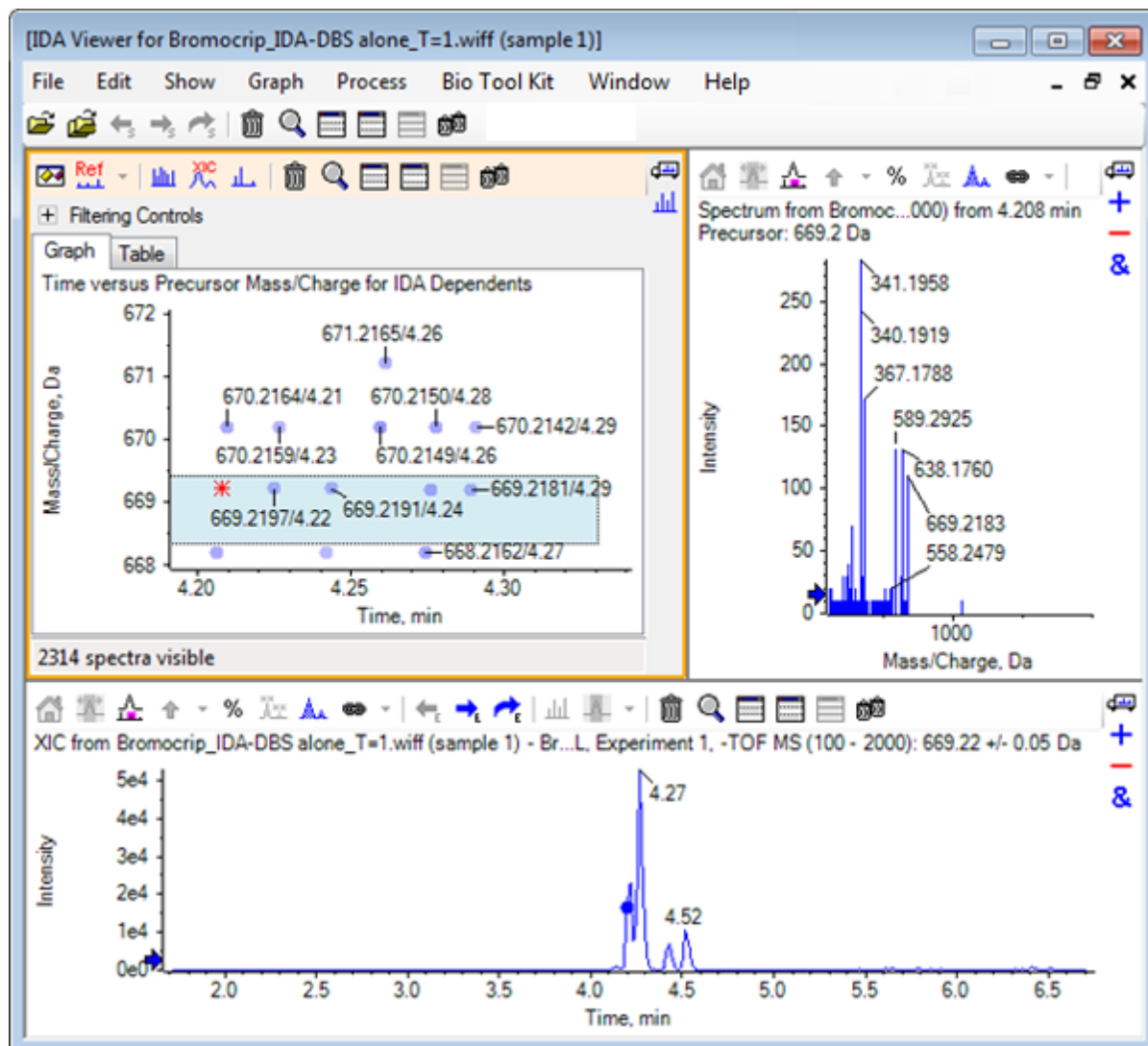


Esercitazione per Explorer

7. Selezionare il primo dei picchi 669.2197 (mostrato come asterisco nel pannello di destra precedente) e quindi fare clic sull'icona **Visualizza un XIC per la selezione** per mostrare il XIC per questa massa precursore nella scansione di analisi.

La selezione iniziale del picco fa sì che sia mostrato lo spettro MS/MS corrispondente.

Figura D-42: XIC per massa precursore nella scansione di analisi



Se esiste un punto dati non etichettato in Contour Plot, spostarvi il cursore sopra per mostrare il rapporto m/z e l'etichetta del tempo di ritenzione in modo che i tempi delle scansioni ioniche del prodotto siano relativi al cromatogramma dell'analisi.

Per il picco 669.2, le prime tre scansioni sono correlate al primo picco XIC a 4.21 min, che è anche dove è stata generata una scansione 668.2, le seconde due scansioni sono correlate al picco a 4.27 min, e l'ultima scansione è dal picco a 4.42 min (669.2177/4.46). Nessuna scansione è stata eseguita per il picco 669.2 a 4.52 min, ma una scansione è stata ottenuta per il picco 670.2.

Nota: I tempi di scansione sono leggermente diversi in quanto sono ottenuti sequenzialmente, anche se sono stati rilevati nella stessa scansione di analisi. I picchi degli isotopi più piccoli potrebbero non essere rilevati presto quanto quelli più grandi.

8. Disegnare un rettangolo di selezione attorno alle prime cinque scansioni 669.2, fare clic con il pulsante destro del mouse, quindi selezionare **Select Points in Graph Selection**.

Ciò fa sì che il riquadro dello spettro si sovrapponga a tutti gli spettri MS/MS.

Il sistema ha acquisito più scansioni del necessario. Riducendo il numero di spettri da elaborare e unendo quelli che sono troppo vicini per essere composti diversi, possiamo ottenere risultati di qualità superiore. L'unione utilizza la massa e il tempo di ritenzione per determinare tali scansioni.

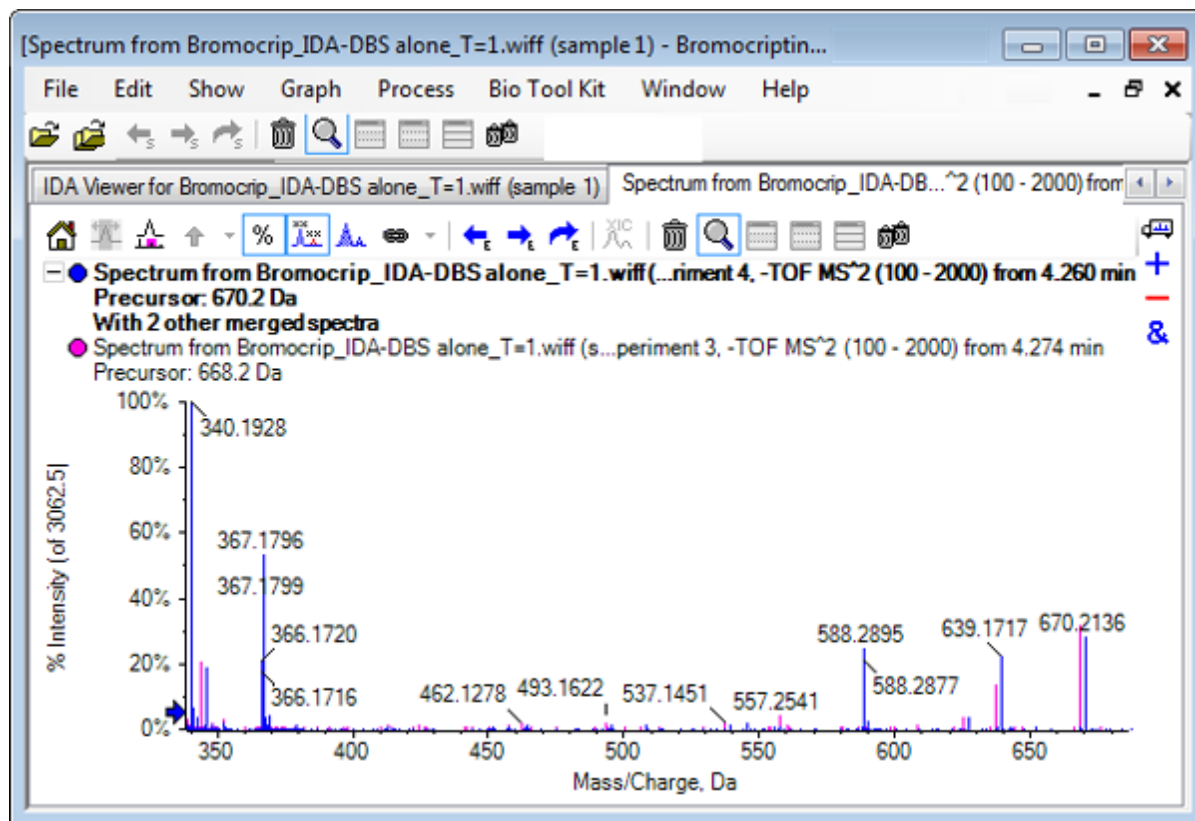
9. Fare clic sull'icona **Mostra opzioni**, selezionare la casella di controllo **Merge spectra with similar precursor masses**, quindi impostare **Mass tolerance** a **10 ppm** e **RT gap tolerance** a **0.03 min.** (i picchi in questa analisi hanno circa 2 secondi di larghezza).
 10. Fare clic su **OK**.
-

Nota: Questa parte della finestra di dialogo consente inoltre agli utenti di definire la modalità di estrazione dei XIC. La larghezza di massa dovrà corrispondere alla risoluzione o larghezza di picco dello strumento ed è utile per limitare l'intervallo di tempo utilizzato in quanto ciò velocizza l'elaborazione.

L'unione dei dati in questo modo comporta tre picchi per 669.2 a 4.21, 4.28 e 4.46 min. La barra di stato nella parte inferiore del riquadro IDA Viewer mostra il progresso man mano che i dati sono uniti e quindi mostra il numero totale di spettri dipendenti dopo il completamento dell'unione.

11. Fare clic sul punto dati a 670.2149/4.26 e quindi premere il tasto **Ctrl** e fare clic sul punto a 668.2162/4.27.
12. Nel riquadro dello spettro MS/MS, fare clic sull'icona **Espande il riquadro attivo per riempire la finestra**, sull'icona **Utilizza Percentuale Asse Y**, e sull'icona **Etichettare tutte le tracce sovrapposte**, quindi ingrandire l'asse x per mostrare la regione da 340 a 680.

Figura D-43: Spettro: regione da m/z 340 a 680 ingrandita



Poiché questi due precursori corrispondono agli isotopi Br, gli spettri dovrebbero essere identici tranne gli ioni che conservano l'atomo Br, che sono mostrati come coppia di picchi separati da due Da. In questo esempio i frammenti (traccia 668.2) a 344.0441, 625.1765 e 637.1712 hanno conservato l'atomo Br mentre quelli a 340.1925, 367.1796 e 588.2877 no.

Collocare una freccia al picco 588.2877 e osservare che i picchi a 668 e 670 ora sono etichettati con la massa degli isotopi Br più 1, indicando che 588.2877 corrisponde alla perdita di HBr.

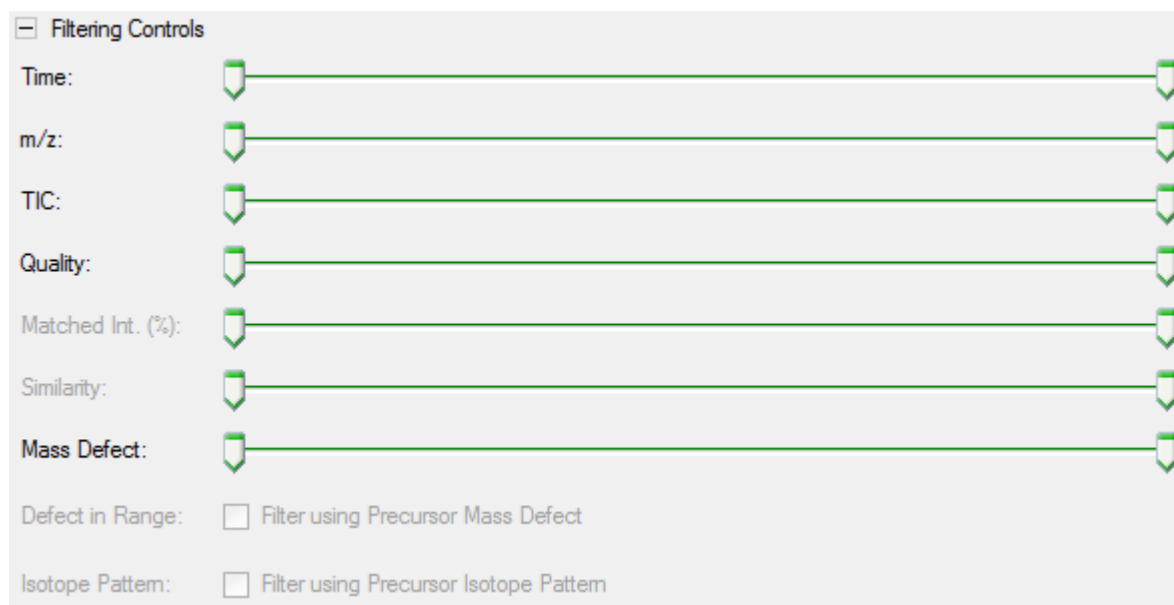
13. Rimuovere la freccia dallo spettro, fare clic sull'icona **Expands active pane to fill window**, quindi ingrandire il Contour Plot per visualizzare tutti i punti dati.

Filtrare dati IDA

IDA Explorer contiene alcuni filtri che è possibile utilizzare per ridurre la quantità di dati da visualizzare o elaborare. Questi sono descritti in questa sezione.

1. Nel Contour Plot, fare clic sull'icona **Espande il riquadro attivo per riempire la finestra**, quindi fare clic sull'icona accanto a **Filtering Controls** appena sotto la barra degli strumenti.

Figura D-44: Filtrare dati IDA



Questa finestra mostra diversi cursori e caselle di controllo, ciascuno corrispondente a un diverso criterio di filtro che è possibile utilizzare per adattare la quantità di dati mostrati. Il tempo di ritenzione (**Time**) e il rapporto m/z (**m/z**) possono essere selezionati qui o ingrandendo la visualizzazione.

Gli altri filtri sono:

- **TIC**: imposta limiti per l'intensità sommata di picchi nello spettro MS/MS. Questo è di solito utilizzato per rimuovere le piccole scansioni rumorose.
- **Quality**: questa è la frazione dell'intensità sommata che è maggiore dell'equivalente di 1 conteggio; in altri termini, è meno probabile che sia dovuto a rumore, ed è una stima della qualità spettrale.
- **Matched Int. (%)**: valuta la frazione dell'intensità sommata spiegata da frammenti noti e perdite neutrali quando si utilizza **Fragment Matching**.
- **Similarity**: disponibile quando è stato impostato uno spettro di riferimento. Questa funzione misura la frazione dell'intensità sommata che corrisponde ai frammenti comuni e alle perdite neutrali nello spettro di riferimento. Fare riferimento a [Utilizzare uno spettro di riferimento](#).
- **Mass Defect**: imposta un intervallo singolo per la parte frazionata di una massa. Questa funzione è utile per trovare metaboliti in quanto le trasformazioni metaboliche comuni (O, O₂ e così via) non cambiano significativamente il difetto dalla molecola precursore, quindi utilizzando un intervallo vicino al suo difetto può rivelare i metaboliti possibili.
- **Defect in Range**: oltre al singolo intervallo di difetto di massa, il software consente agli utenti anche di definire diversi difetti che si applicano a diversi intervalli di massa. Se tali intervalli sono definiti, questa casella di controllo consente agli utenti

Esercitazione per Explorer

di determinare se applicare o meno il filtro. Gli intervalli sono impostati nella scheda **Mass Defect** della finestra di dialogo **Options**.

- **Isotope pattern**: questa casella di controllo consente agli utenti di applicare uno o più filtri di schemi di isotopi ai dati dell'analisi MS. In altri termini, un punto dati è mostrato solo se lo ione precursore selezionato ha lo schema desiderato. Questi schemi sono definiti nella scheda **Isotope Pattern** della finestra di dialogo **Options**.

Ciascuno dei semplici filtri ha due cursori, in modo che sia possibile definire un intervallo. Fare doppio clic su qualsiasi cursore e digitare direttamente un valore.

2. Sperimentare con le impostazioni dei cursori e notare in particolare che anche basse impostazioni minime per valori **TIC** (ad esempio $1e3$) o **Quality** (1) hanno un effetto drammatico. Impostare il filtro **TIC** inferiore a $2e3$ e tutti gli altri a 0.

Il difetto di massa della bromocriptina è di circa 0.22, quindi è improbabile che i metaboliti semplici abbiano valori maggiori di questo o molto minori.

3. Impostare i filtri **Mass Defect** a 0.18 e 0.23 e notare che fra i picchi restanti vi sono quelli nelle vicinanze di 4.5 min e 650 Da e che esiste un solo punto dati da un rapporto m/z di 652.2211 in questa regione (4.40 min).
4. Nascondere i controlli del filtro facendo clic sull'icona accanto a **Filtering Controls**.

Suggerimento! Cambiare i filtri che sono visibili facendo clic con il pulsante destro del mouse nell'area di filtro, selezionando **Filters** e quindi selezionando quelli che sono appropriati.

Utilizzare uno spettro di riferimento

1. Nella planimetria con curve di livello, fare clic sul punto di dati a 652.2211/4.40 (la stessa bromocriptina) e poi fare clic sull'icona **Impostare spettro di riferimento (per punteggio di somiglianza)**.

Nota: Potrebbe essere necessario ingrandire prima il grafico.

2. Fare clic sulla freccia accanto all'icona **Impostare spettro di riferimento (per punteggio somiglianza)** e assicurarsi che **Overlay Reference Spectrum** sia selezionato.
3. Fare clic sul punto di dati a 654.2185/4.39.

Con uno spettro di riferimento definito e **Overlay Reference Spectrum** selezionato, gli spettri mostrati hanno anche lo spettro di riferimento sovrapposto, così possono essere facilmente confrontati. È utile quando si lavora con metaboliti, perché fornisce un modo rapido di determinare quali picchi siano spostati e quali no.

Abbiamo fatto il riferimento dello spettro MS/MS dello ione precursore per l'isotopo di bromo di massa inferiore e abbiamo sovrapposto lo spettro per l'isotopo di massa superiore, così abbiamo una visualizzazione simile a quella generata in precedenza per il picco di 668.2, vale a dire ioni contenenti bromo che possono essere identificati dalla presenza di picchi separati da due Da.

4. Fare clic sull'icona **Espande il riquadro attivo per riempire la finestra** e poi, nel tracciato con curve di livello, fare clic su **Table** (appena sotto **Filtering Controls**).

Nota: Se necessario, spostare il riquadro dello spettro sotto la tabella (tramite l'icona Trascinare la selezione per riorganizzare i riquadri) affinché tutte le colonne siano visibili.

La tabella mostra le stesse informazioni dell'explorer grafico, ma fornisce ulteriori dettagli. Inoltre, risponde ai controlli di filtro affinché le due visualizzazioni contengano gli stessi spettri. La tabella è collegata alla visualizzazione dello spettro, così la selezione delle righe comporta l'aggiornamento dello spettro e le righe possono essere classificate facendo clic sulle intestazioni della colonna.

Quando viene definito uno spettro di riferimento, vengono mostrate due colonne supplementari: **Delta m/z** mostra la differenza tra la massa precursore di riferimento e lo spettro corrispondente alla riga. **Similarity** mostra la somiglianza fra i due spettri.

5. Fare clic su **Delta m/z** per ordinare la tabella e osservare che contiene svariati picchi che differiscono di circa 15.995 (la massa dell'ossigeno) e uno a 31.990 (O₂) che sono probabilmente metaboliti idrossi-bromocriptina.
6. Fare clic su una riga della tabella per mostrare gli spettri associati.

Nota: Questi spettri hanno valori molto somiglianti alle scansioni con le masse precursori superiori di due Da che sono ottenute dagli ioni contenenti ⁸¹Br.

Riepilogo

In questa sezione sono state trattate le seguenti attività:

- Esaminare un file IDA utilizzando le visualizzazioni IDA Explorer grafiche e tabellari.
- Unione di spettri correlati dopo aver determinato che questo è richiesto.
- Filtrare il numero di spettri mostrati utilizzando TIC e i filtri di difetto di massa.
- Sovrapposizione di spettri in modo che possano essere confrontati.
- Definizione di uno spettro di riferimento e utilizzo della tabella per trovare probabili metaboliti.

Queste operazioni sono fondamentali per l'elaborazione dei dati IDA.

La sezione successiva descrive come utilizzare gli strumenti della struttura utilizzando lo spettro MS/MS della bromocriptina.

Lavorare con Strumenti di struttura

Il software contiene strumenti che permettono di collegare le masse degli ioni alle strutture (salvate come file .mol) e di esplorare possibili siti per biotrasformazioni.

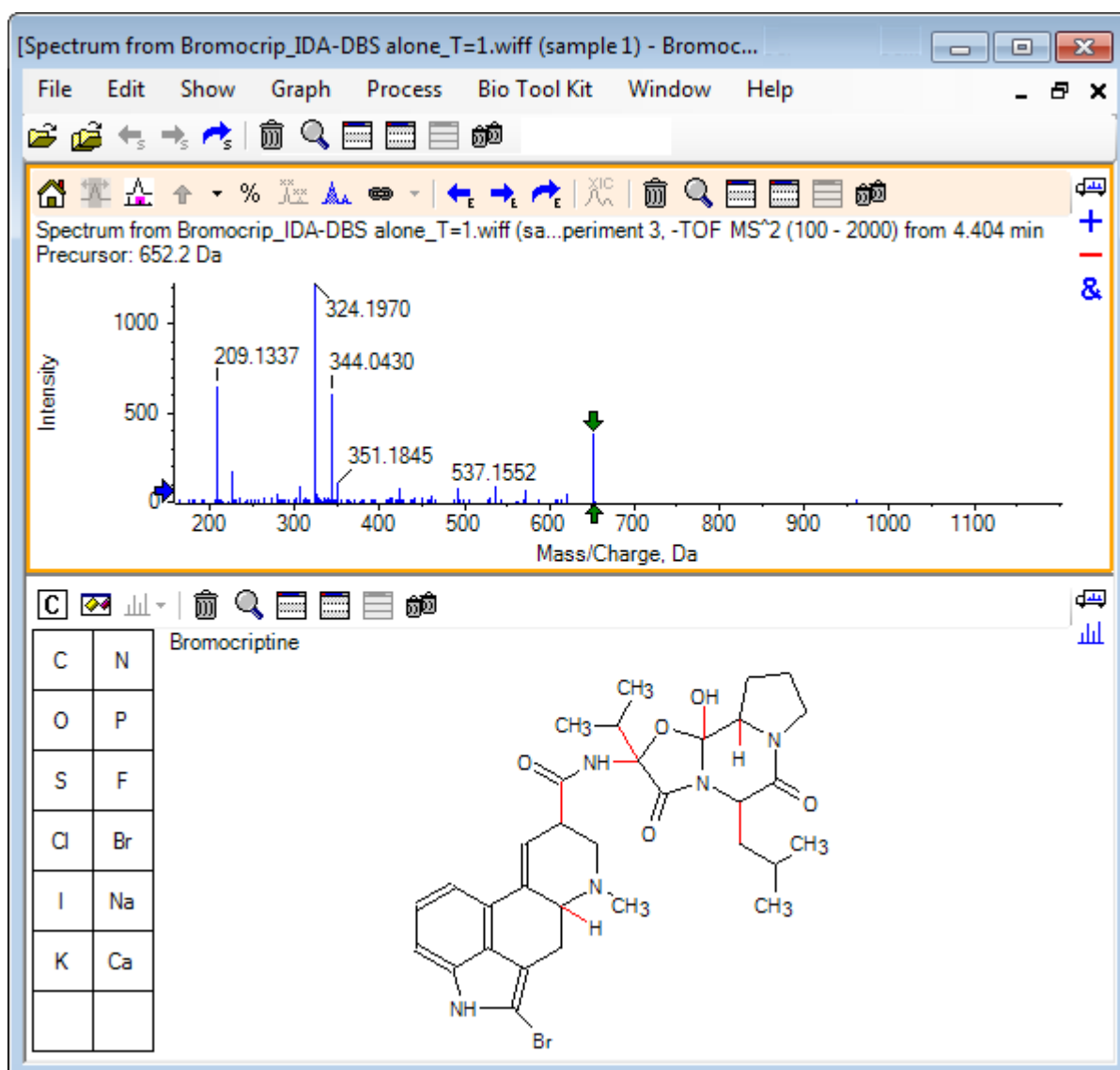
Collegare una struttura a uno spettro MS/MS

1. Localizzare lo spettro MS/MS della bromocriptina, 652.2211/4.40. Fare riferimento a [Lavorare con IDA Explorer](#).

Esercitazione per Explorer

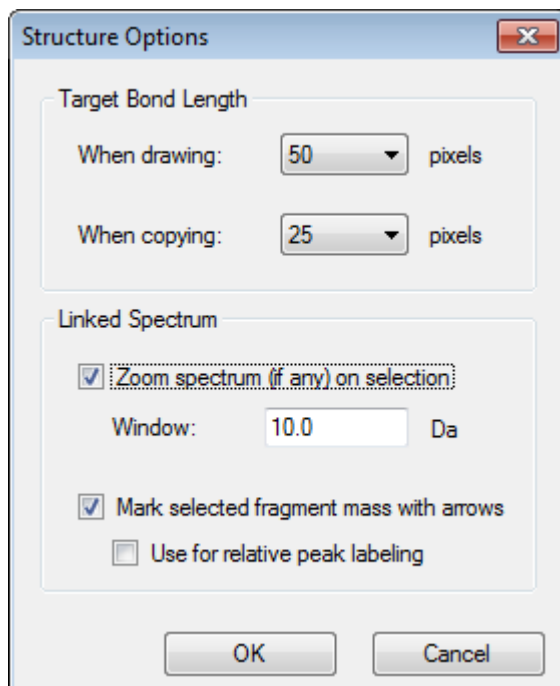
2. Fare clic sull'icona **Nasconde tutti gli altri riquadri** nel Contour Plot in modo che sia visibile solo lo spettro.
3. Fare clic su **File > Open Mol File**.
4. Nella finestra di dialogo **Select Mol File**, selezionare il file **Bromocriptine.mol** e quindi fare clic su **Open**. Per informazioni sui percorsi dei file dati installati, fare riferimento a [Organizzazione](#).
Un nuovo riquadro si apre accanto allo spettro per mostrare la struttura e gli strumenti.

Figura D-45: Struttura della bromocriptina



5. Fare clic sulla finestra di dialogo **Show options** nel riquadro Structure, accertarsi che siano selezionate le caselle di controllo **Zoom spectrum (if any) on selection** e **Mark selected fragment mass with arrows**, quindi fare clic su **OK**. È possibile lasciare invariati gli altri parametri.

Figura D-46: Finestra di dialogo Structure Options



Lo spettro e la struttura sono automaticamente collegati in quanto lo spettro era attivo quando era stato creato il riquadro Structure. Collegare manualmente una struttura a uno spettro trascinando l'icona **Displays a spectrum for selection** sullo spettro appropriato.

Il trascinamento nel riquadro Structure fa sì che una linea (un lazo) segua il cursore, consentendo agli utenti di selezionare, in tutto o in parte, la struttura che è quindi disegnata in grassetto. Poiché esiste uno spettro collegato, questo ingrandisce e scorre per mostrare la regione attorno alla massa della sottostruttura selezionata.

6. Disegnare un lazo attorno all'intera molecola e la visualizzazione cambia per mostrare il picco a un rapporto m/z di 652.2177, che corrisponde allo ione $(M - H)^-$.

Poiché la casella di controllo **Mark selected fragment mass with arrows** è stata selezionata, una freccia rossa è disegnata sopra e sotto il picco, indicando che questa è la massa prevista di uno ione corrispondente alla regione selezionata (ovvero $(M - H)^-$ poiché questi dati sono in modalità negativa).

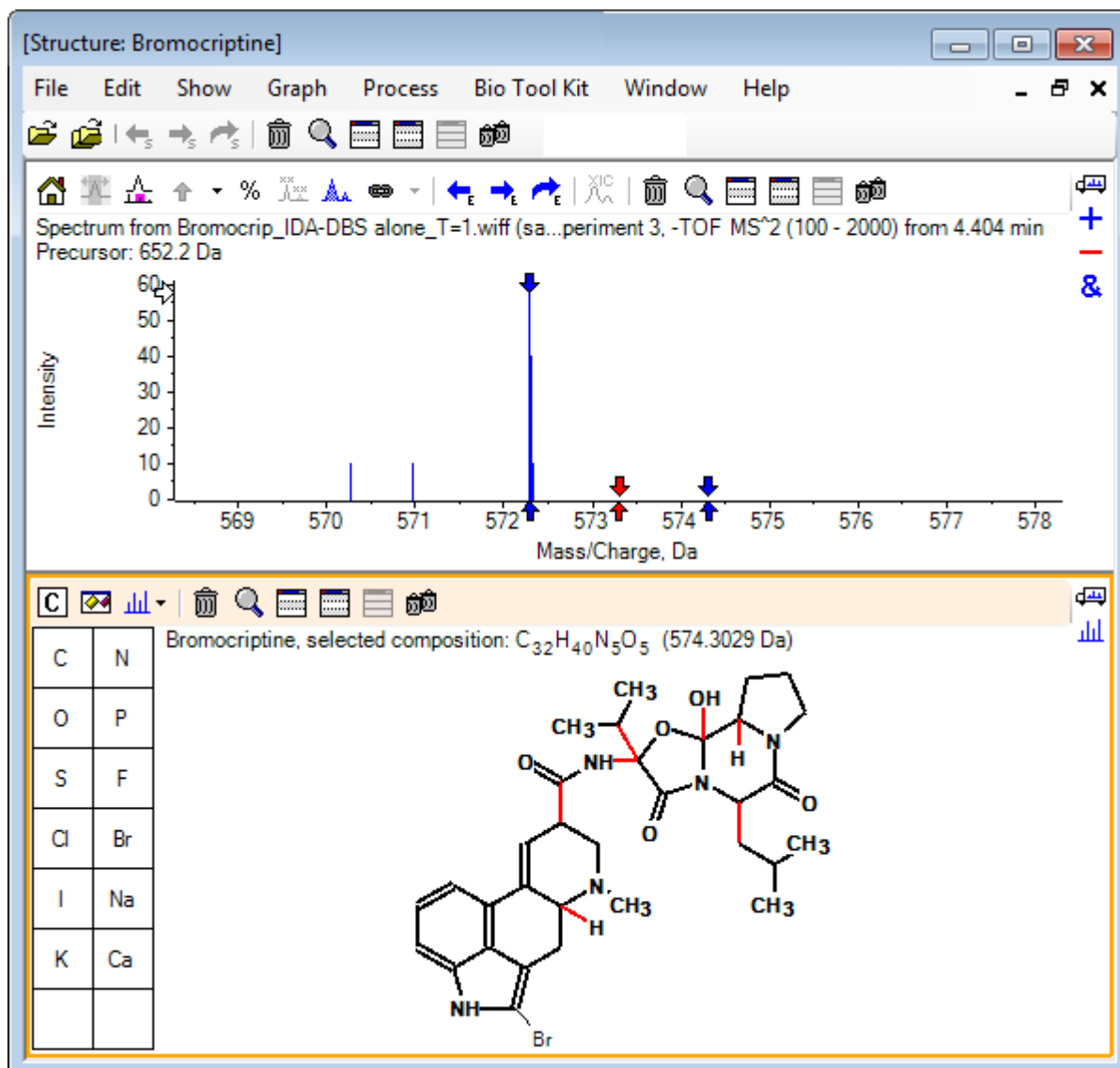
Nota: Il titolo del riquadro Structure indica la composizione in termini di elementi e la massa del composto neutrale corrispondente alla selezione (in altri termini, $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$ con una massa di 653.2213 Da).

Se si seleziona **Mark selected fragment mass with arrows**, una freccia verde è disegnata sul picco 652.2177 quando nel riquadro Structure non è selezionato nulla. Ciò perché la freccia verde contrassegna il complemento della selezione attuale e senza alcuna selezione il complemento è l'intera molecola.

Esercitazione per Explorer

7. Selezionare l'intera molecola, eccetto l'atomo di bromo. Fare riferimento alla [Figura D-47](#).

Figura D-47: Struttura della bromocriptina



Nota: L'atomo di bromo è l'unico in caratteri normali e per cui il titolo nel riquadro Structure mostra la composizione $C_{32}H_{40}N_5O_5$ con una massa di 574.3029 Da. Nello spettro, la freccia rossa indica la massa prevista della selezione; in altri termini, la massa dello ione molecolare $(M - H)^-$ meno la massa del bromo, ed esistono frecce a distanza di 1 Da su uno dei lati. Per gli atomi di idrogeno aggiuntivi è comune essere guadagnati o persi durante la frammentazione e il software indica questa possibilità disegnando una coppia di frecce blu a +1 e -1 per ciascun legame rotto. In questo caso è rotto solo un legame, quindi esistono solo due frecce aggiuntive.

Il picco effettivo nello spettro corrisponde a una di queste frecce, indicando che un atomo extra di idrogeno è stato perso, cioè HBr, in modo che la massa dello ione corrisponda a $(M - H - HBr)^-$.

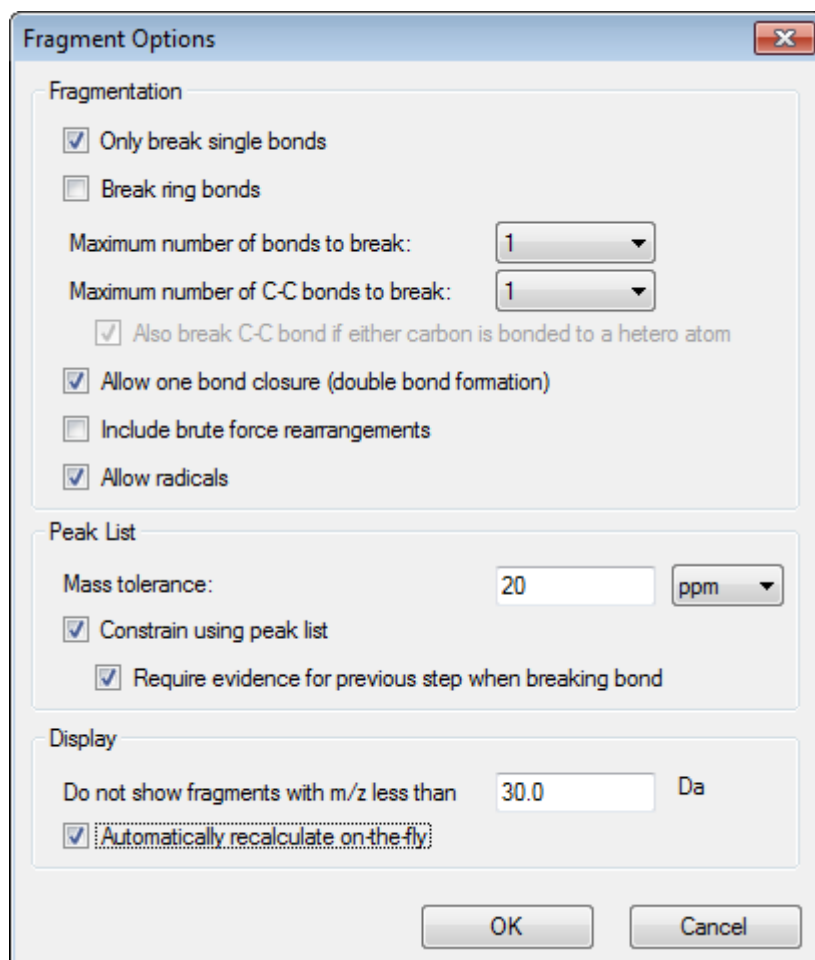
Lavorare con i frammenti

Il software contiene un predittore ione frammentato che può generare la massa delle specie formate rompendo i legami e aggiungendo o rimuovendo gli atomi di idrogeno.

Nota: La previsione è puramente aritmetica, non utilizza la logica chimica e tende a sovrastimare i frammenti prodotti, ma è uno strumento utile per analizzare frammenti.

1. Col riquadro Structure attivo, fare clic su **Show > Fragments Pane**. Può essere mostrata una barra di progressione, a seconda delle impostazioni nella finestra di dialogo **Fragment Options**. Fare riferimento alla [Figura D-48](#).
2. Fare clic sull'icona **Mostra finestra di dialogo delle opzioni**, impostare i parametri come mostrato nella [Figura D-48](#), quindi fare clic su **OK**.

Figura D-48: Finestra di dialogo Fragment Options



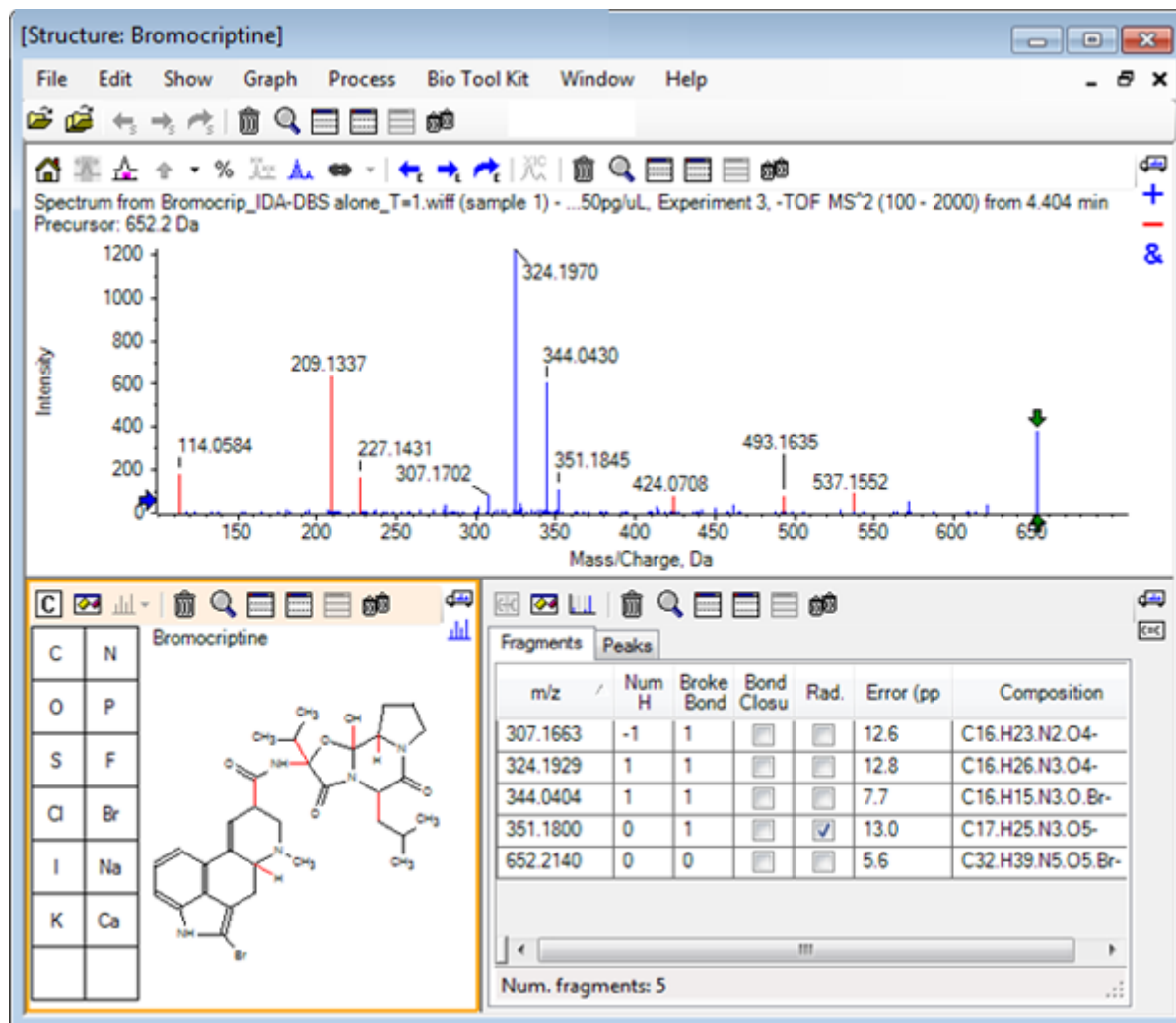
Impostare le opzioni in modo che sia prodotto un piccolo insieme di frammenti semplici e quindi aumentare il numero e il tipo dei legami rotti nella misura necessaria per spiegare gli ioni osservati. Consentire la rottura di molti legami rallenta il programma e genera un grande numero di frammenti improbabili.

La maggior parte dei parametri nella finestra di dialogo **Fragment Options** è descritta nella *Guida di riferimento*, ma va notato quanto segue:

- Se si seleziona la casella di controllo **Automatically recalculate on-the-fly**, qualsiasi modifica allo spettro (passaggio a uno diverso, adattamento dei parametri) o selezione causa il ricalcolo dei frammenti. Questo è di solito il comportamento desiderato, ma può avere un impatto sulla velocità dell'analisi se le opzioni sono impostate in modo da produrre molti frammenti. Se non si utilizza questa opzione, fare clic sull'icona **Frammento**.
- **Constrain using peak list** significa che il software mostra solo frammenti che corrispondono ai picchi nello spettro con la tolleranza appropriata.
- **Require evidence for previous step when breaking bond** è efficace solo quando si rompe più di un legame. Il programma per prima cosa rompe un legame e quindi considera la rottura dei legami nelle parti risultanti. Se si seleziona questa opzione, devono essere presenti ioni corrispondenti alle parti prima che siano ulteriormente rotti.

Con questi parametri, la visualizzazione dovrebbe assomigliare alla [Figura D-49](#) ma dovrebbe essere leggermente diversa in quanto sono considerati solo i picchi superiori all'impostazione della soglia (anche questa etichettata).

Figura D-49: Struttura della bromocriptina



Nota: I picchi nello spettro sono colorati per indicare quelli assegnati (blu) e quelli non assegnati (rosso) corrispondenti ai picchi nella scheda Fragments.

Il riquadro Fragments contiene due schede:

- **Fragments:** in questo esempio, l'elenco è breve in quanto non sono generati molti frammenti in queste condizioni e solo alcuni di questi corrispondono ai picchi nello spettro, come richiesto, in quanto è stata selezionata la casella di controllo **Constrain using peak list**.
- **Peaks:** mostra una tabella che elenca i picchi nello spettro che sono superiori alla soglia, le relative intensità, e se siano stati assegnati o meno a un frammento. Per i picchi assegnati è anche mostrato l'errore della massa.

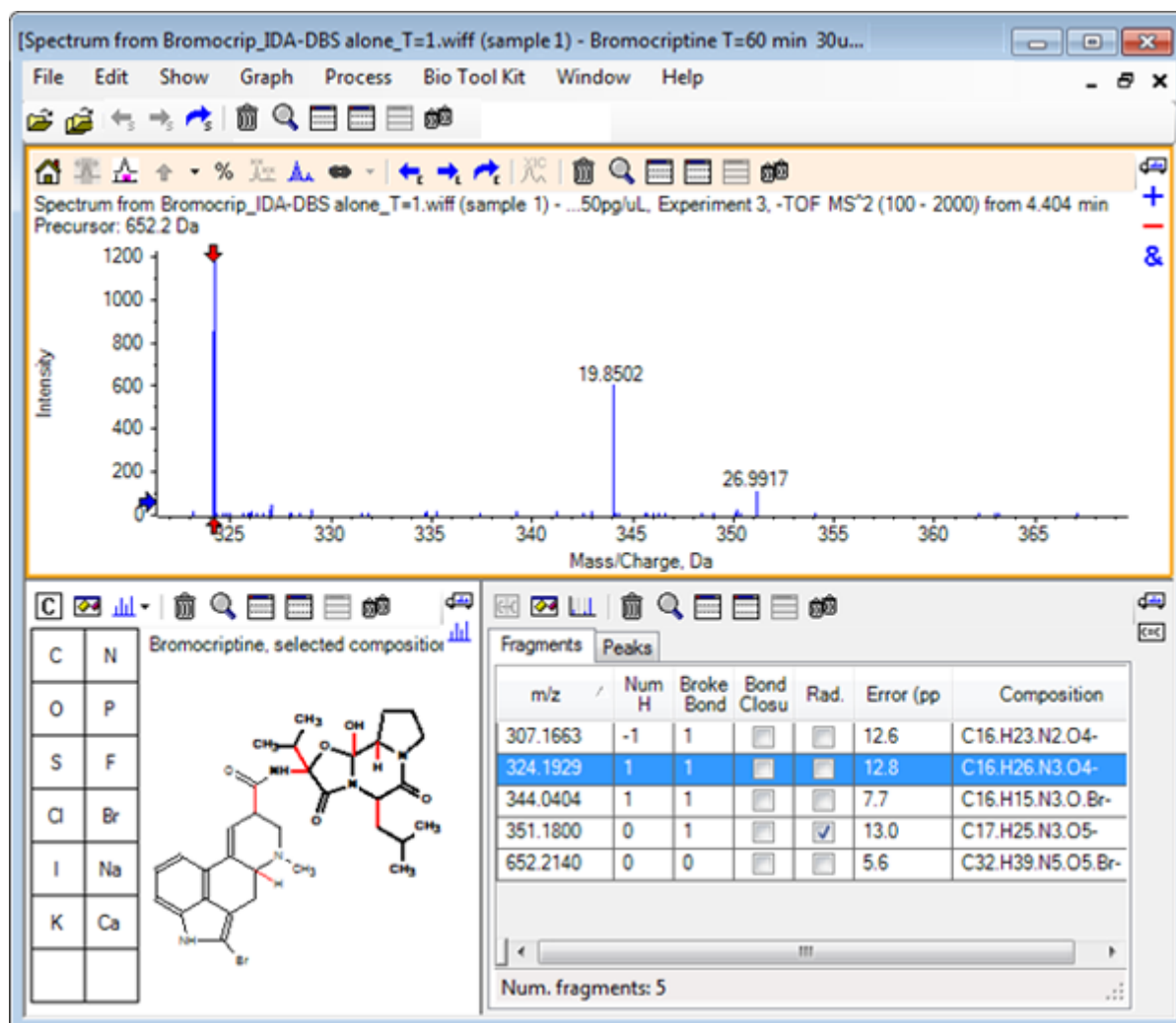
Figura D-50: Riquadro Fragments

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. Nella scheda **Fragments**, selezionare la riga per un rapporto m/z di 324.1929. Il picco è contrassegnato con una freccia rossa per mostrare che questa è la massa prevista, e la sottostruttura corrispondente è disegnata in grassetto nel riquadro Structure.

Figura D-51: Finestra di dialogo Fragmentation



Nota: La composizione e la massa nel titolo del riquadro Structure ora rispecchiano la massa dello ione piuttosto che il valore neutro.

4. Esaminare le strutture assegnate per gli altri frammenti.

Sono tutte correlate al legame ammidico centrale che separa le due parti cicliche della molecola e sembrano possibili.

Nota: Le composizioni elementari assegnate sono coerenti agli spettri sovrapposti che sono stati generati in [Utilizzare uno spettro di riferimento](#) dove la presenza di Br nei frammenti è stata dedotta confrontando gli spettri di ^{79}Br - e ^{81}Br - contenenti ioni molecolari.

5. Ingrandire lo spettro in modo che sia visibile l'intero intervallo di massa. Sono assegnati due dei picchi maggiori, un m/z di 324.1970 e un m/z di 344.0430, corrispondenti alle due dimensioni della molecola, e sono disegnati in blu. Tuttavia, sono presenti alcuni picchi non ancora assegnati.

Esercitazione per Explorer

6. Aprire la finestra di dialogo **Options** e quindi modificare **Maximum number of bonds to break** in **2**.

Nota: A seconda dell'impostazione della soglia, questa opzione potrebbe fare sì che alcuni piccoli picchi siano assegnati, ma non quelli più abbondanti (rapporti m/z di 114.0584, 209.1337 e 227.1431 ad esempio). Se lo spettro è etichettato rispetto a una freccia rossa, fare clic nel riquadro Structure per cancellare eventuali selezioni per mostrare i valori di massa assoluti.

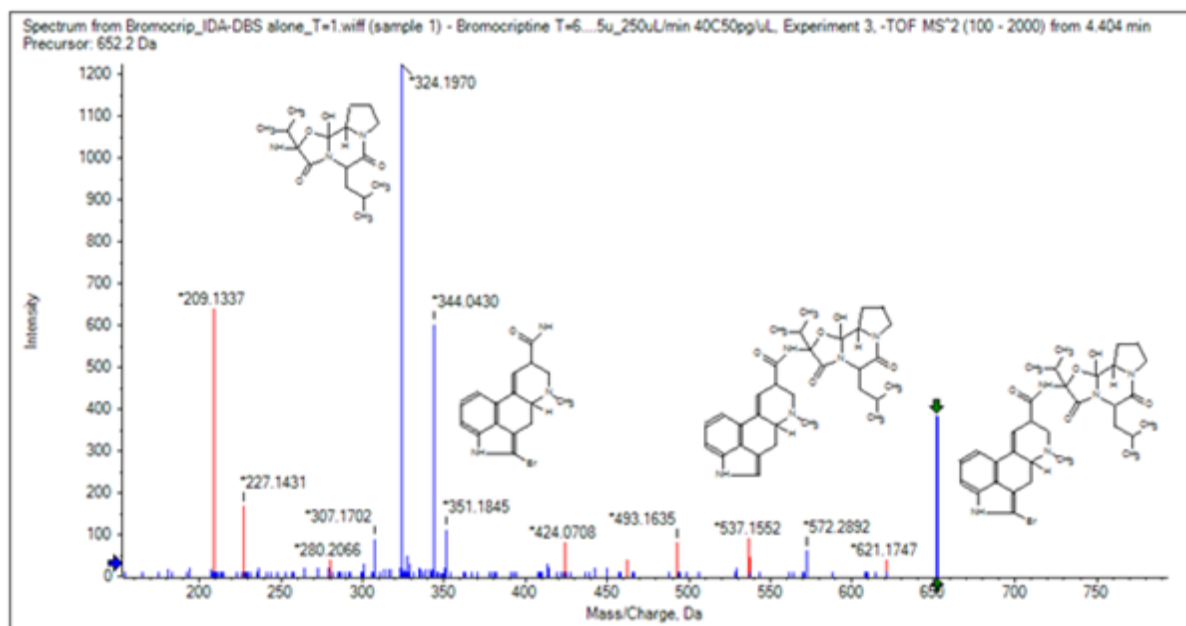
7. Selezionare la casella di controllo **Break ring bonds** e quindi fare clic su **OK**. Ora corrispondono diversi ioni aggiuntivi, compresi quelli a rapporti m/z di 209.1337 e 227.1431. La selezione delle nuove masse nel riquadro **Fragments** per evidenziare le sottostrutture mostra che queste sono correlate a scissioni dell'anello nella parte peptidica ciclica della molecola. È probabile che questi ioni siano utili nella determinazione dei siti di trasformazione metabolica in questa regione.

Aggiungere sottostrutture a uno spettro

Selezionare parti della struttura e utilizzarle per annotare lo spettro per riferimento futuro. A seconda della dimensione del riquadro dello spettro, utilizzare la finestra di dialogo **Options** nel riquadro della struttura per adattare **Target Bond Length** per la copia.

1. Nella finestra di dialogo **Fragment Options**, cancellare la casella di controllo **Break ring bonds** per semplificare il numero di frammenti.
2. Nel riquadro dei frammenti, selezionare una riga corrispondente a uno degli ioni più abbondanti per evidenziare la sottostruttura corrispondente.
3. Fare clic all'interno del riquadro della struttura.
4. Fare clic su **Edit > Copy**.
5. Fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro dello spettro attivo e quindi fare clic su **Paste Image**.
Ciò fa sì che un'immagine della sottostruttura sia incollata nel riquadro dello spettro.
6. Spostare l'immagine trascinandola nella posizione desiderata. È possibile eliminare un'immagine completamente, facendo clic con il pulsante destro del mouse e quindi selezionando **Delete Image**.
Le immagini sono collegate allo spettro, ovvero alle posizioni di intensità di massa, quindi si spostano quando gli utenti scorrono e utilizzano lo zoom.
7. Ripetere i passaggi da 2 a 6 per altri ioni frammentati per generare un'immagine finale simile alla [Figura D-52](#).

Figura D-52: Spettro con sottostrutture aggiunte



8. Fare clic su **File > Print > Print Preview Window** per verificare il posizionamento delle sottostrutture.
Poiché gli ioni corrispondenti sono disegnati in blu, sono facili da associare alle strutture corrispondenti.
9. Copiare l'immagine e quindi incollarla in un programma di disegno per aggiungere linee o altre funzionalità.

Lavorare con spettri MS/MS correlati

In alcune applicazioni, è utile essere in grado di confrontare lo spettro di un composto modificato, ad esempio un metabolita, allo spettro e alla struttura del composto precursore.

1. Utilizzare IDA Explorer per mostrare nuovamente il Contour Plot. Selezionare il picco a 668.2176/4.21 e quindi nascondere il Contour Plot.

Poiché i riquadri Structure e Fragments sono collegati allo spettro, sono stati aggiornati per rispecchiare il nuovo spettro, ma la struttura è ancora quella del composto precursore mentre lo spettro è stato ottenuto da un composto con un atomo di ossigeno aggiuntivo (maggiore di 16 Da in termini di massa). In molti casi esistono ancora alcune corrispondenze, indicando le parti della molecola che non sono modificate, ma in questo caso nessuno degli ioni significativi corrisponde ed è disegnato in rosso.

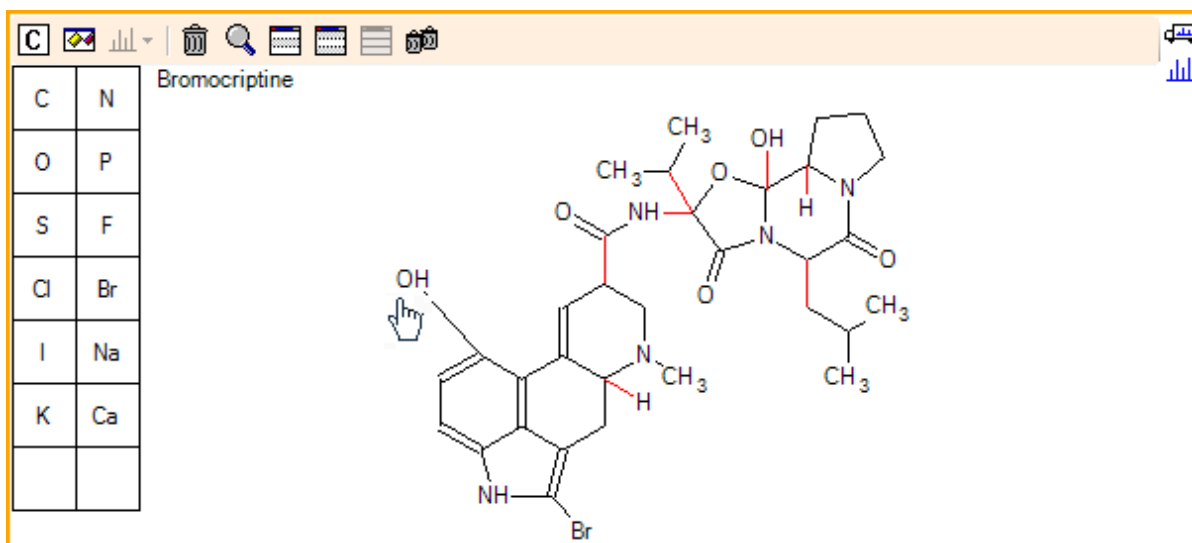
Il riquadro Structure contiene alcuni semplici strumenti di disegno che consentono modifiche alla struttura per vedere se sia possibile trovare corrispondenze.

2. Il lato sinistro del riquadro Structure contiene una griglia con simboli di elementi. Fare clic su **O** e quindi trascinarlo verso la struttura principale.
Quando l'atomo è vicino alla struttura, è unito con un legame che segue il cursore quando è trascinato vicino alla struttura.

Esercitazione per Explorer

- Trascinare il simbolo **O** in modo tale che un legame sia disegnato con la parte minore della struttura (ergolinea) e rilasciare il mouse (ad esempio, collocare il nuovo atomo sull'anello fenilico). La [Figura D-53](#) mostra il processo.

Figura D-53: Riquadro Struttura

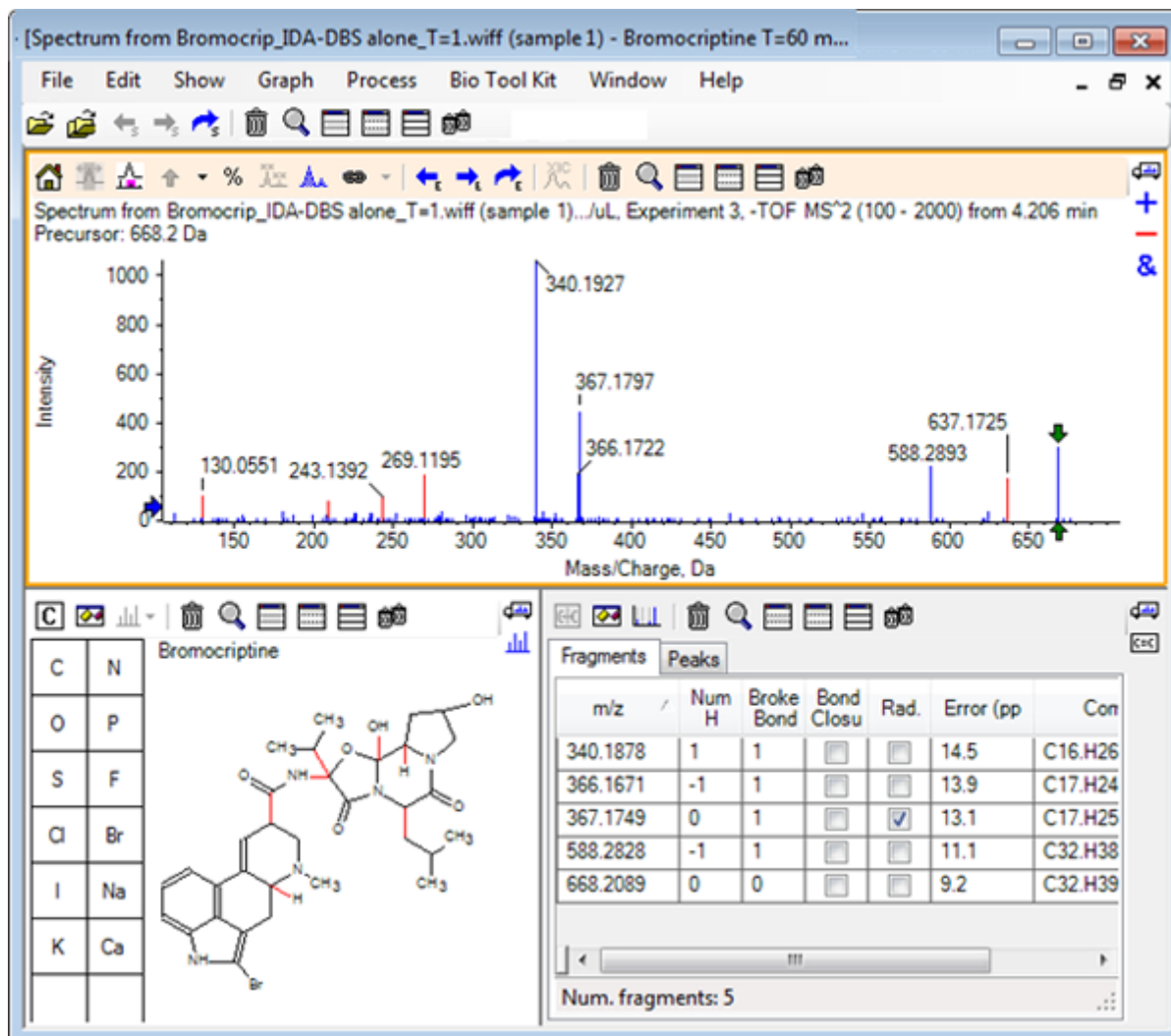


Lo spettro si aggiorna nuovamente e mostra due corrispondenze: lo ione molecolare a 668.2089 e lo ione corrispondente alla perdita di HBr a 588.2828. Ciò suggerisce che la composizione elementare complessiva ora sia corretta, ma il fatto che i principali componenti non corrispondano suggerisce che l'atomo non sia stato aggiunto alla parte destra della molecola.

- Fare clic sul gruppo **OH** appena aggiunto e quindi trascinarlo all'anello pirrolidina nella parte superiore della struttura. Accertarsi che solo l'atomo spostato sia disegnato in grassetto. Altrimenti, è spostata l'intera sottostruttura evidenziata.

Come mostrato in [Figura D-54](#), ciò fa sì che gli ioni a 340.1927, 366.1722 e 367.1797 siano messi in corrispondenza e le sottostrutture corrispondenti e le forme idrossilate di ioni messi in corrispondenza nello spettro del composto precursore.

Figura D-54: Spettro da bromocriptina



Molti dei picchi di massa bassa senza corrispondenza erano presenti nello spettro precursore, oppure sono equivalenti agli idrossilati, che erano messi in corrispondenza quando all'algorithmo era consentito rompere legami ad anello, ma esiste uno ione di massa elevata a 637.1725 che è probabilmente dovuto a un passaggio di frammentazione semplice ed è ancora senza corrispondenza.

- Nella scheda **Fragments**, selezionare la riga per 668.2089 in modo che sia etichettata e che gli altri ioni siano etichettati rispetto a questa. Ciò mostra che il picco a 637.1725 corrisponde alla perdita di 31.0364 dalla molecola precursore che potrebbe essere CH_3NH_2 o CH_3O . Poiché questo ione non era osservato nello spettro della molecola precursore, sembra molto probabile che sia derivato dal verificarsi dell'idrossilazione a uno dei gruppi metilici nella parte peptidica ciclica della struttura.
- Fare clic due volte nel riquadro Structure per deselegionare la struttura e quindi trascinare il nuovo gruppo **OH** in uno dei gruppi metilici alla destra della struttura.

Esercitazione per Explorer

7. Aprire la finestra di dialogo **Fragment Options**, impostare **Mass tolerance** a 30 ppm, quindi fare clic su **OK**.
Lo ione 637 è ora messo in corrispondenza e la selezione di questa riga nel riquadro Fragments mostra che lo ione potrebbe corrispondere alla perdita di una parte metossi.
8. Aprire la finestra di dialogo **Fragment Options**, selezionare la casella di controllo **Break ring bonds**, quindi fare clic su **OK**.
La maggior parte dei frammenti può ora essere messa in corrispondenza, anche se lo ione a 209 può essere messo in corrispondenza solo se a tre legami è consentito rompersi (i due necessari per la molecola precursore più la perdita dell'atomo di ossigeno aggiuntivo).

Nota: Il riquadro Fragments ora contiene più righe per alcune delle masse, ad esempio 637.1905. Ciascuna di queste righe corrisponde a un diverso frammento possibile (e ne sono generati anche altri se è consentita la rottura di tre legami). La scheda Peaks nel riquadro Fragments mostra solo la corrispondenza che si ritiene sia la migliore in base a una combinazione dell'accuratezza della massa, al numero di legami rotti, al fatto che il frammento sia un radicale, e così via. In questo caso, la corrispondenza migliore è con un frammento che potrebbe essere stato generato per il composto precursore ma non era stato osservato, quindi le opzioni aggiuntive mostrate nella scheda Fragments possono essere utili per suggerire potenziali percorsi che non sono ovvi.

Riepilogo

In questa sezione sono state trattate le seguenti attività:

- Inserire una struttura come un file .mol e quindi collegarla a uno spettro.
- Selezionare le parti della struttura e determinare se c'è un picco di massa corrispondente.
- Creare un riquadro di frammenti e impostare i parametri per osservare frammenti semplici.
- Lavorare con le schede **Fragments** e **Peaks** per mostrare le composizioni corrispondenti, le sottostrutture e i picchi di massa.
- Modificare le **Fragment Options** per consentire vie di frammentazione più complesse.
- Aggiungere le sottostrutture in un riquadro dello spettro.
- Modificare la struttura per esplorare la frammentazione di molecole correlate come i metaboliti.

In generale, è buona norma iniziare consentendo processi di frammentazione semplice e opzioni aggiuntive di frammentazione (legami aggiuntivi, legami ad anello) come è necessario per spiegare gli ioni osservati. Ciò è coerente con il fatto che gli ioni frammentano tipicamente un frammento in una serie di passaggi, formando dapprima frammenti più semplici, piuttosto che in un passaggio combinato che rompe i legami multipli. Naturalmente, un semplice frammento potrebbe essere instabile e frammentarsi ulteriormente subito, così da non essere osservato. Inoltre, consentendo un numero elevato di passaggi di frammentazione, serve più tempo per elaborare e per completare.

Quando si confrontano le molecole correlate, può essere utile sovrapporre lo spettro di riferimento (molecola precursore) e la forma modificata, e poi collegare la visualizzazione in un riquadro della struttura o dei frammenti che si aggiorna quando lo spettro attivo viene

scambiato. Tuttavia, la colorazione applicata agli ioni abbinati e senza riscontro può risultare difficile da distinguere se esistono sovrapposizioni, quindi è consigliabile che si lavori con singoli spettri fino a quando non si è acquisita una certa familiarità con il programma e le visualizzazioni.

Lavorare con campioni multipli

Sebbene sia comune lavorare con un singolo campione, esistono occasioni in cui possono essere ottenute in un momento ulteriori informazioni attraverso il confronto o la visualizzazione di alcuni campioni. Questa sezione illustra alcuni degli strumenti disponibili nel software prima per due campioni e poi per campioni multipli.

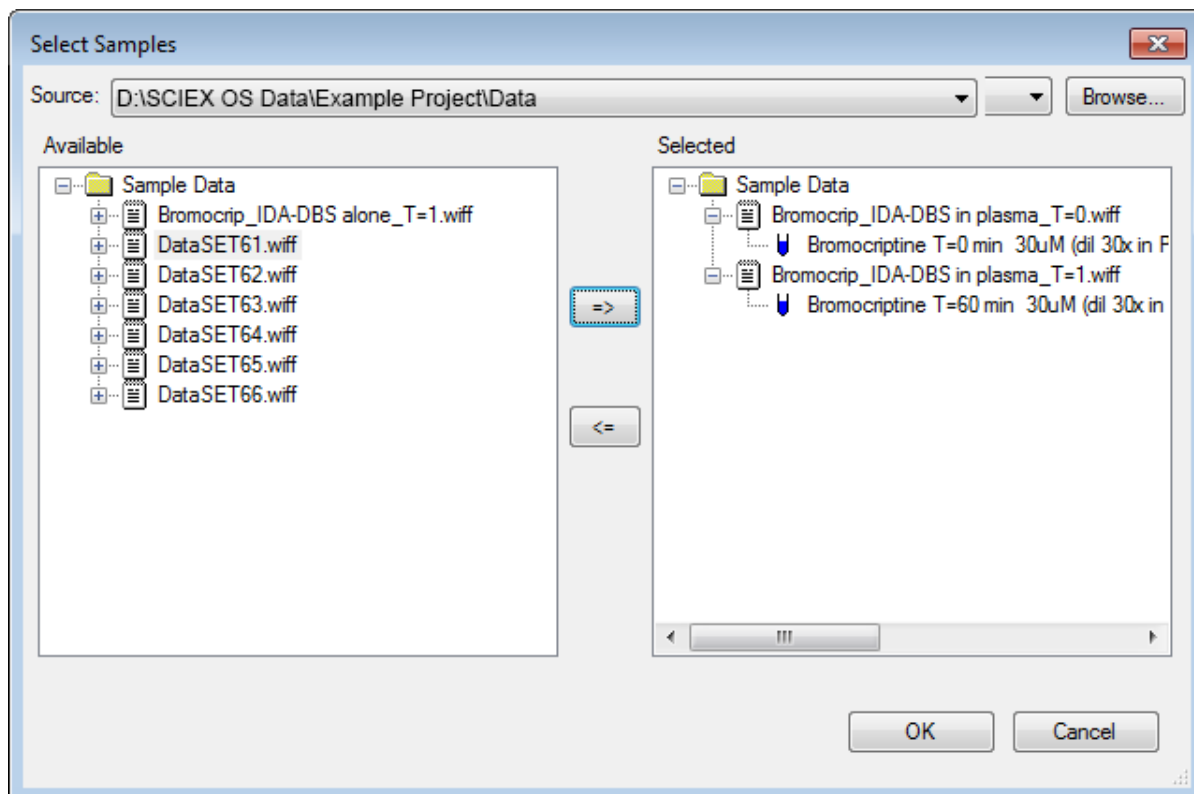
Lavorare con due campioni

Un flusso di lavoro comune è di confrontare due campioni ottenuti in condizioni diverse per determinare le modifiche. Ad esempio, due diversi punti temporali dopo la somministrazione di un farmaco. I dati confrontati per questo esercizio (T = 0 ore e T = 1 ora) derivano da un'incubazione di bromocriptina con microsomi di fegato di ratto addizionati nel plasma.

Chiudere tutte le finestre aperte prima di iniziare.

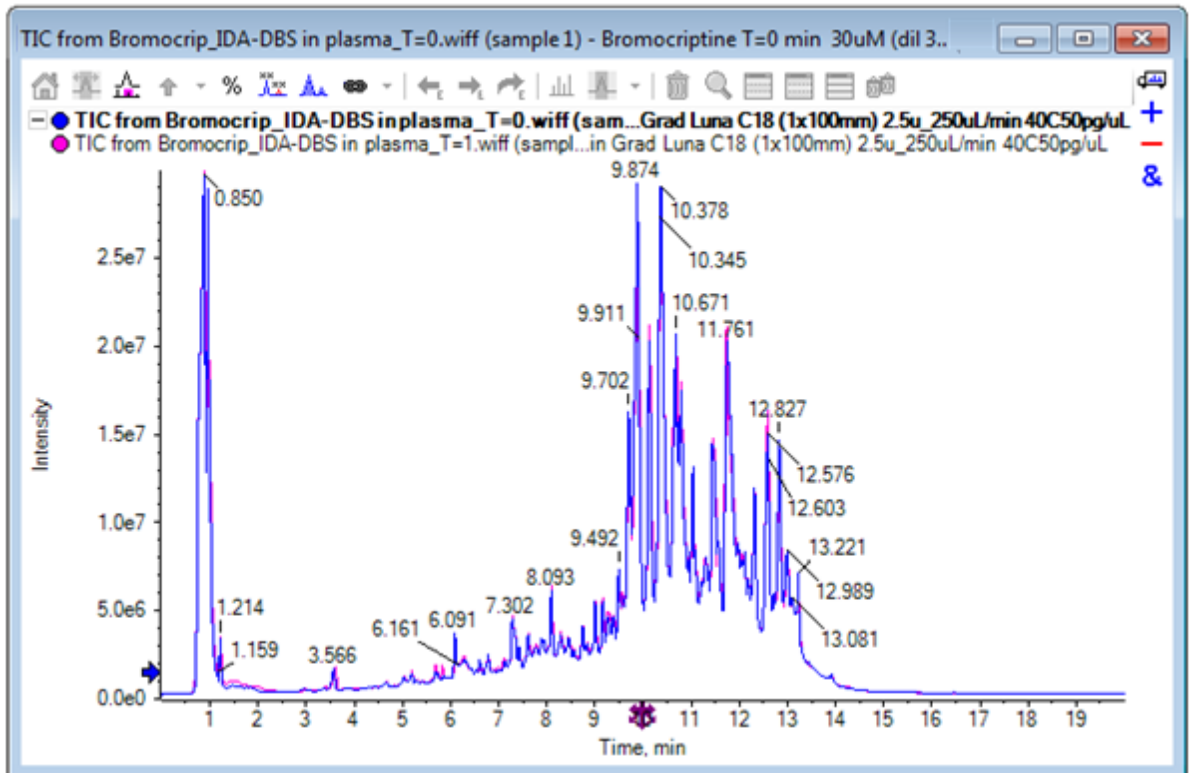
1. Fare clic su **File > Open Multiple Samples**, quindi sfogliare fino alla cartella contenente i dati campione.
2. Selezionare i file **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=0.wiff** e **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=1.wiff** e quindi trascinare i file sul lato destro della finestra.
3. Fare clic su **OK**.

Figura D-55: Selezionare più campioni



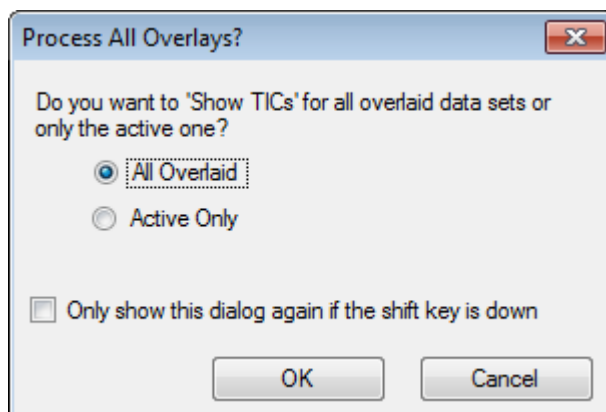
A differenza dell'apertura di un singolo file IDA, in cui sono mostrati TIC differenti per l'analisi e le scansioni dipendenti, con più file IDA è mostrato un singolo TIC di tutti i dati per tutti i campioni. In questo caso, esistono due TIC come mostrato nella [Figura D-56](#).

Figura D-56: TIC



4. Fare clic su **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** per aprire la finestra di dialogo **Select Experiment**.
5. Selezionare **Period 1, Experiment 1 - TOF MS (100 - 2000)** e quindi fare clic su **OK**.

Figura D-57: Finestra di dialogo Process All Overlays



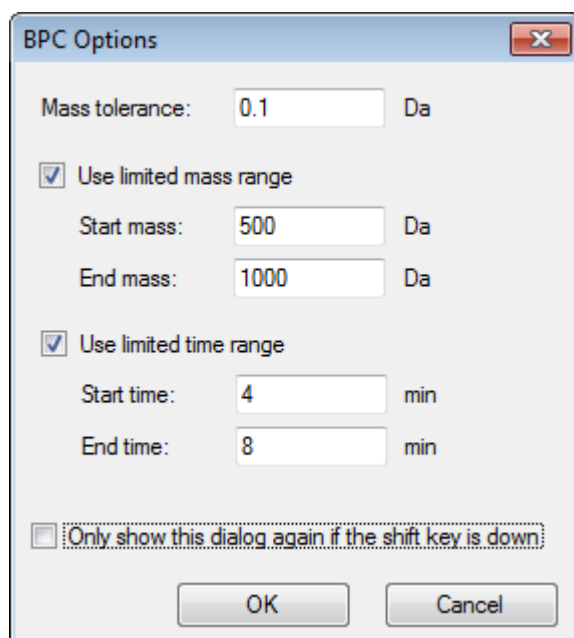
La finestra di dialogo **Process All Overlays**, che è mostrata ogni volta che le tracce sovrapposte sono elaborate, consente agli utenti di scegliere se elaborare tutte le tracce o solo quella attiva. L'elaborazione di tutte le tracce è utile in quanto le operazioni successive influenzano tutte le tracce (campioni).

6. Selezionare **All Overlaid**.

Esercitazione per Explorer

7. Selezionare la casella di controllo **Only show the dialog again if the shift key is down** per rendere questa scelta l'azione predefinita.
 8. Fare clic su **OK**.
Viene generato un riquadro che contiene sovrapposizioni dei TIC dell'analisi. Il cromatogramma è molto riproducibile e i picchi dei metaboliti sono tanto intensi che alcuni possono essere trovati ingrandendo e confrontando i cromatogrammi (esaminare la regione attorno a 6 min.), ma di solito è richiesto ulteriore lavoro. Esistono diversi modi di generare visualizzazioni che sono confrontati più facilmente. Per questo esempio, si utilizza un cromatogramma con picco base.
-
- Nota:** Se si fa clic su **File > Open Heat Map TICs from Wiff**, è possibile generare direttamente le visualizzazioni a striscia senza mostrare prima i cromatogrammi sovrapposti.
-
9. Nascondere il riquadro TIC originale e quindi fare clic su **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.
 10. Nella finestra di dialogo **BPC Options**, modificare le impostazioni, come richiesto, per mettere in corrispondenza i valori nella [Figura D-58](#) e quindi fare clic su **OK**.

Figura D-58: Finestra di dialogo BPC Options



Un cromatogramma di picco base è costruito tracciando l'intensità del picco più grande in ciascuna scansione in funzione del tempo di ritenzione. Per fornire ulteriori informazioni, ciascuna traccia commuta tra il suo normale colore e grigio quando la massa di picco di base cambia di oltre la tolleranza della massa specificata in questa finestra di dialogo.

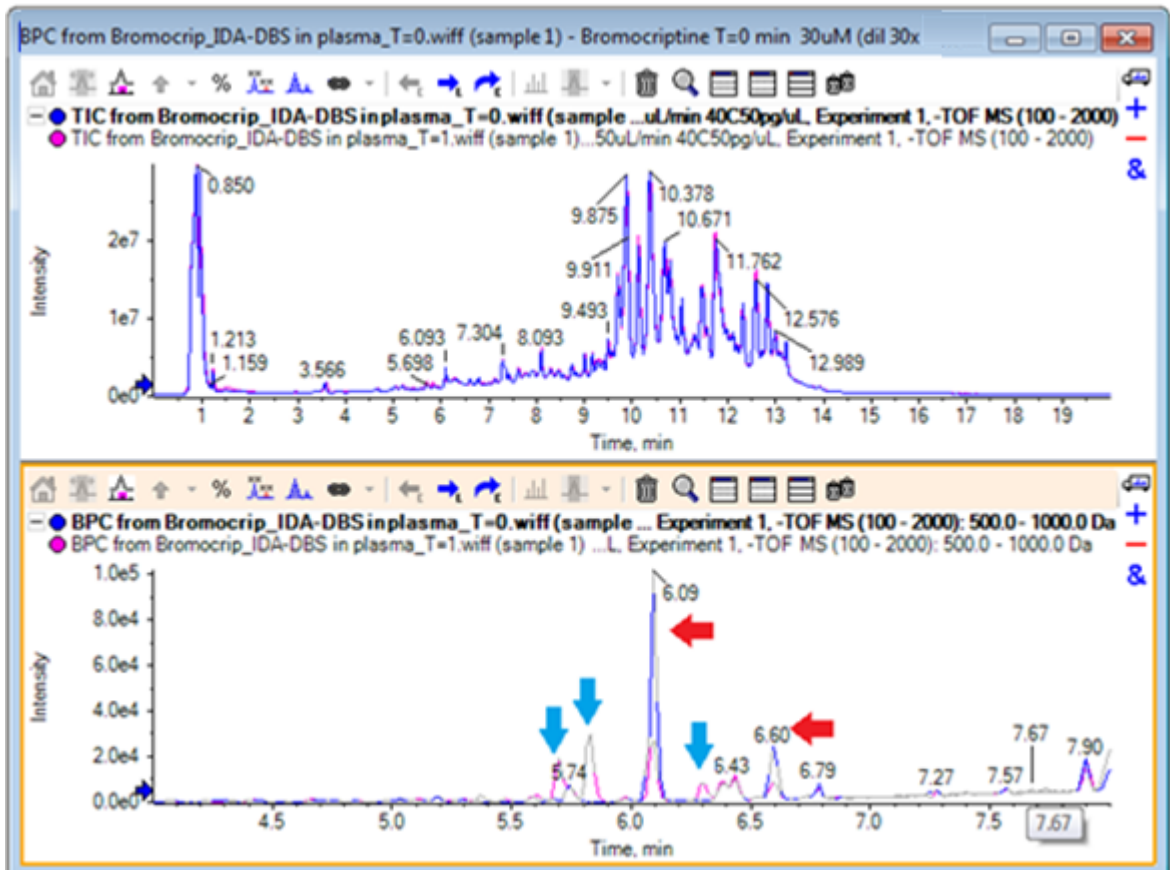
Opzionalmente, è possibile limitare l'intervallo di massa considerato, che può evitare artefatti causati da picchi con fondo rumoroso ad esempio, e impostare l'intervallo di

tempo di ritenzione per velocizzare l'elaborazione. Poiché sappiamo che la massa della bromocriptina è circa 652, i metaboliti semplici non sono sotto un rapporto m/z di 500.

11. Nella finestra di dialogo **Process All Overlays**, accertarsi che l'opzione **All Overlaid** sia selezionata e quindi fare clic su **OK**.

Un nuovo riquadro mostra il BPC, che è molto più semplice e facile da confrontare dei TIC originali.

Figura D-59: BPC



Esistono due picchi (contrassegnati con frecce rosse) che sembrano diminuire nel campione di 1 ora (rosa) confrontato col campione T = 0 (blu). Questi corrispondono alla bromocriptina (6.09 min.) e a un isomero. Esistono anche tre picchi (frecce blu) che sono presenti nel campione T = 1 ma non in quello T = 0. Questi sono potenziali metaboliti.

Nota: Il BPC può essere molto utile, ma rispecchia solo il comportamento dello ione più intenso (nell'intervallo di massa scelto). I picchi di massa che non diventano mai il picco di base non possono mai essere mostrati, quindi utilizzare altri strumenti quando si cercano differenze tra i campioni.

12. Nascondere il riquadro TIC.
13. Fare doppio clic nel riquadro BPC a 6.09 min.

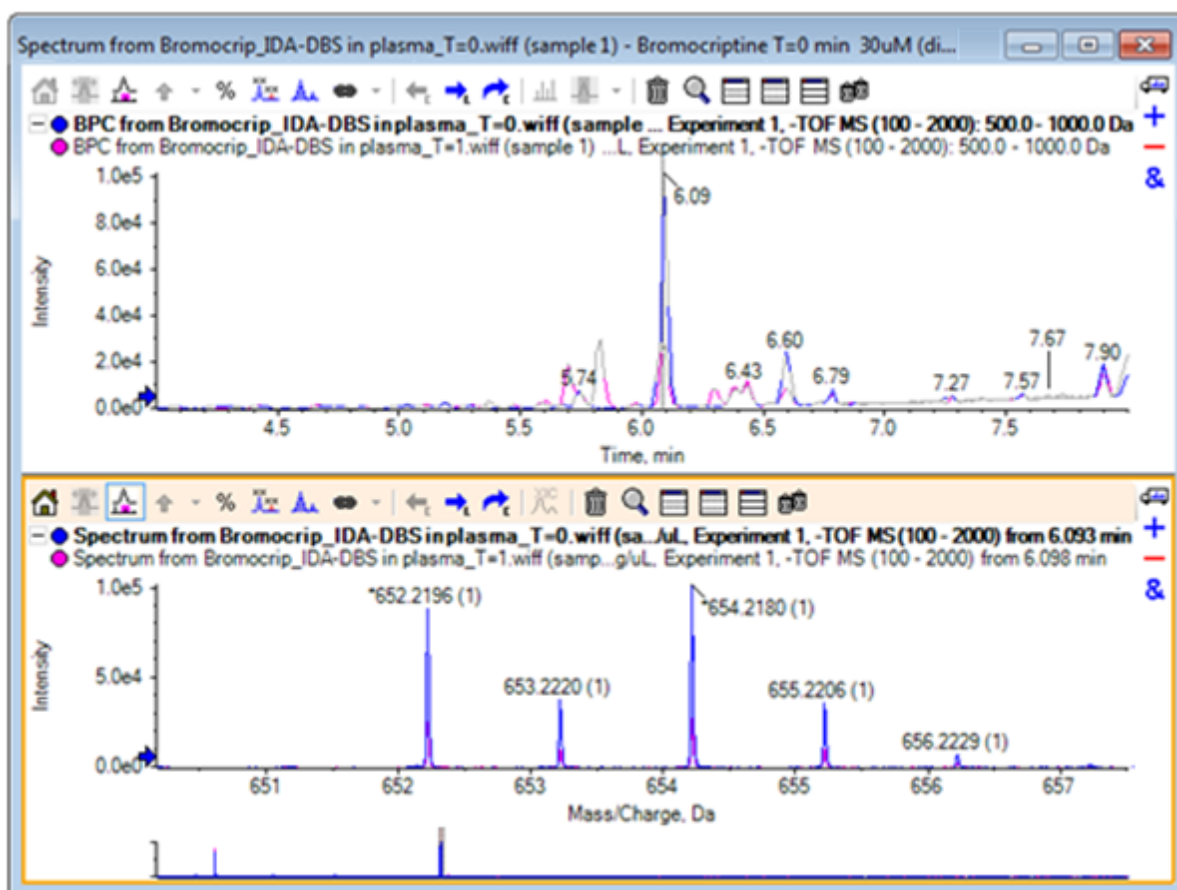
Esercitazione per Explorer

14. Selezionare **All Overlaid** nella finestra di dialogo **Process All Overlays** e quindi fare clic su **OK**.
Ciò genera due spettri sovrapposti.
15. Nel riquadro Spectrum, fare clic e quindi ingrandire per mostrare il cluster di isotopi a un rapporto m/z di circa 652. Fare riferimento alla [Figura D-60](#).

Il riquadro Spectrum contiene spettri sovrapposti dai due campioni, in modo che possano essere facilmente confrontati. In questo esempio, è chiaro che l'intensità nel campione T = 1 h (rosa) è minore che nel campione T = 0.

Il grafico generale è molto prezioso quando si osservano dati ad alta risoluzione come questi, poiché forniscono un modo di osservare i dettagli mantenendo nel contempo visibile l'intero spettro.

Figura D-60: Cluster di isotopi attorno a un rapporto m/z di 652



16. Nel riquadro Chromatogram, spostare il cursore sulla linea che mostra il tempo dello spettro (in precedenza un doppio clic).
17. Quando il cursore cambia in una freccia a due estremità, trascinarlo al picco a circa 5.8 min.

Lo spettro continua a mostrare l'intervallo di massa espanso, che ora ha solo rumore e piccoli picchi. Per mostrare i grandi picchi rosa nella finestra principale, trascinare

il rettangolo rosa nel grafico generale, indicato da una freccia nera sotto questo. La visualizzazione si rinormalizza quando il mouse è rilasciato.

Per la [Figura D-62](#), è stata selezionata l'icona **Etichettare tutte le tracce sovrapposte**.

Figura D-61: BPC e spettro

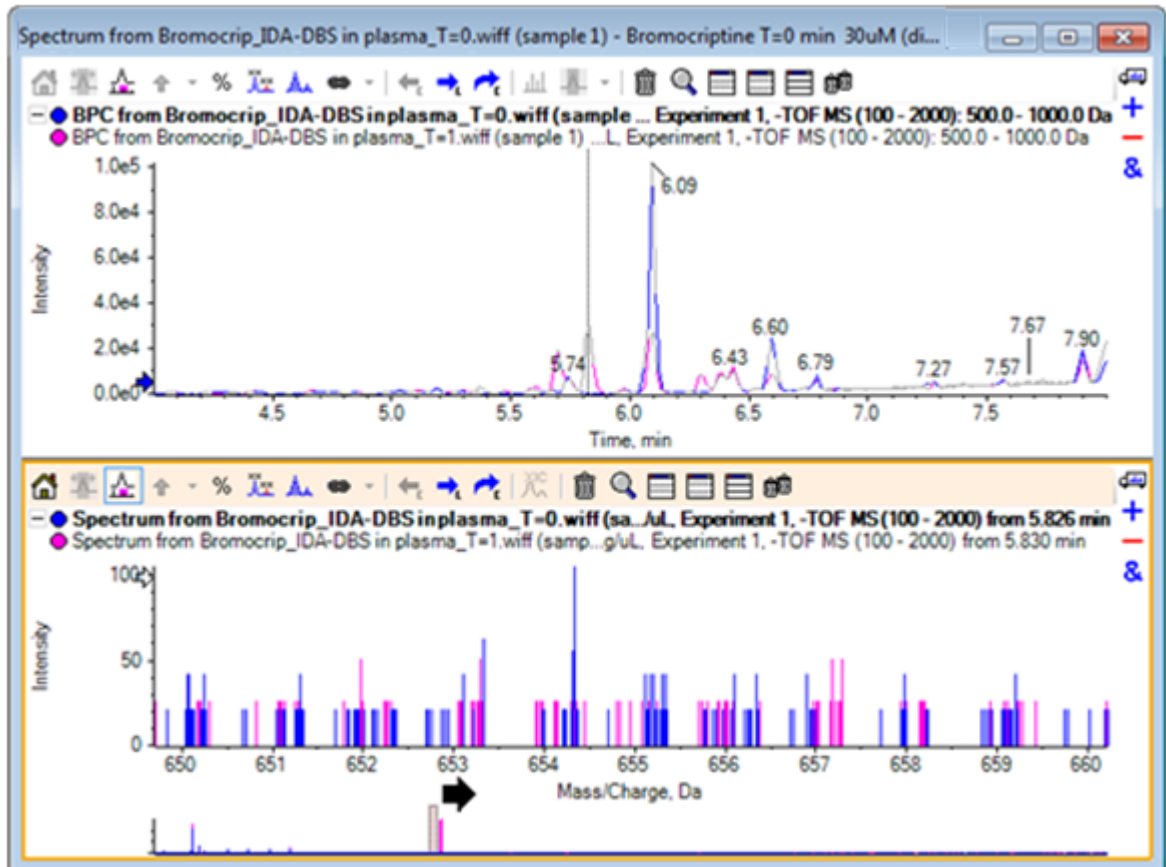
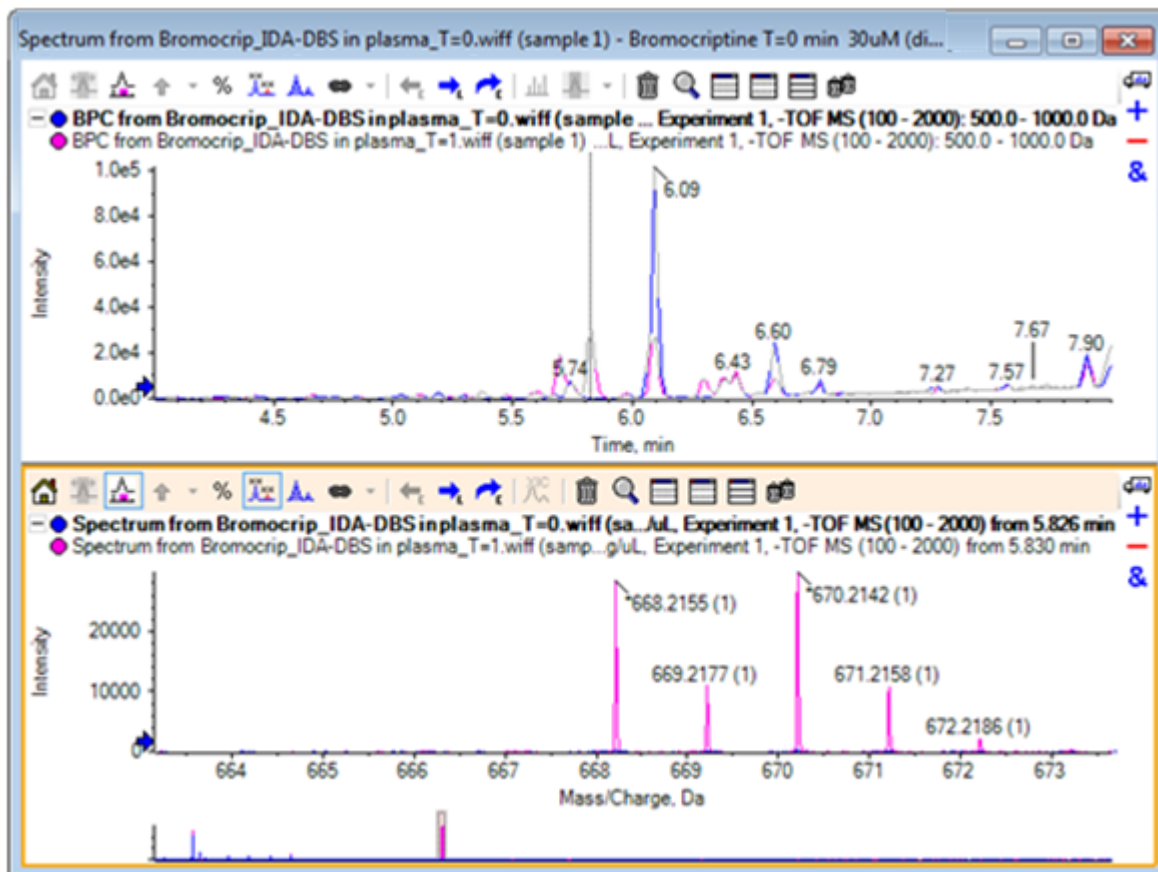


Figura D-62: BPC e spettro con l'opzione Label All Overlaid Traces applicata



Questi picchi sono assenti dal campione T = 0.

18. Chiudere tutte le finestre prima di continuare.

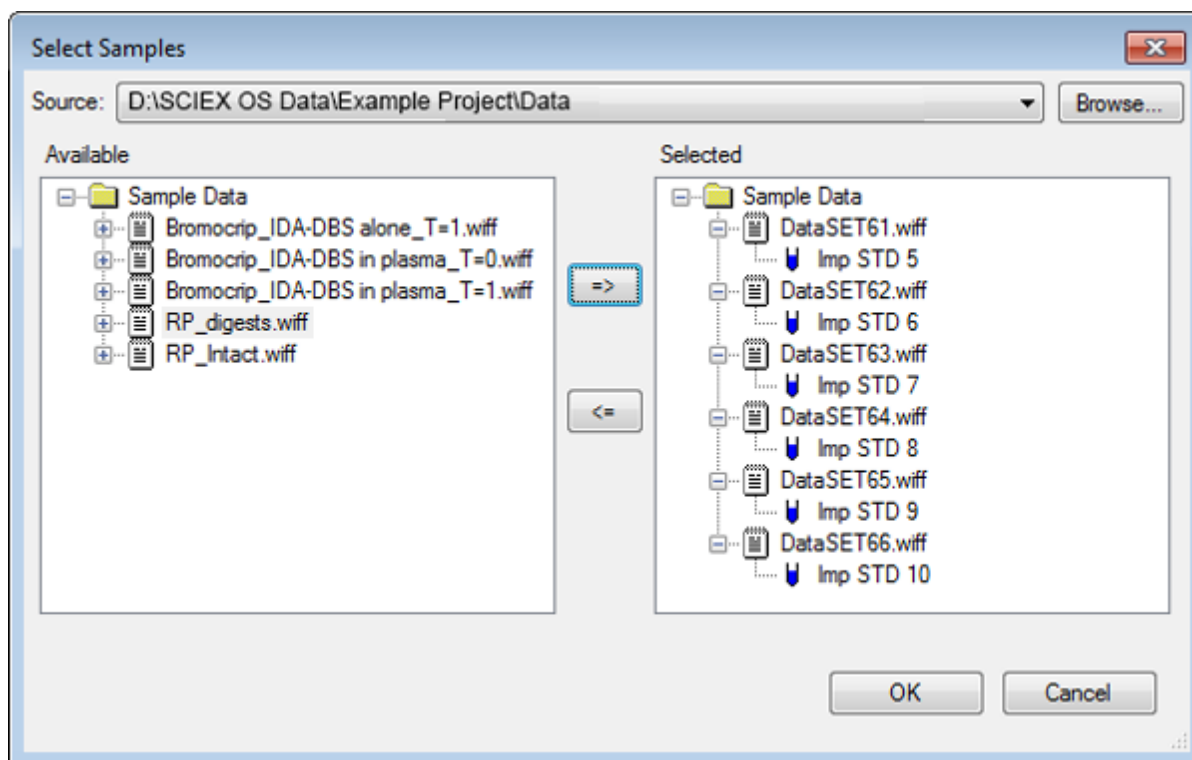
Lavorare con più di due campioni

Con più di due campioni sovrapposti, le finestre possono risultare confuse e può diventare più difficile associare le differenze con il campione corretto. Il software contiene altri strumenti che consentono di visualizzare i dati da molti campioni.

Il set di dati utilizzato per l'esempio proviene da un'analisi del profilo di impurità da sei diversi set di dati.

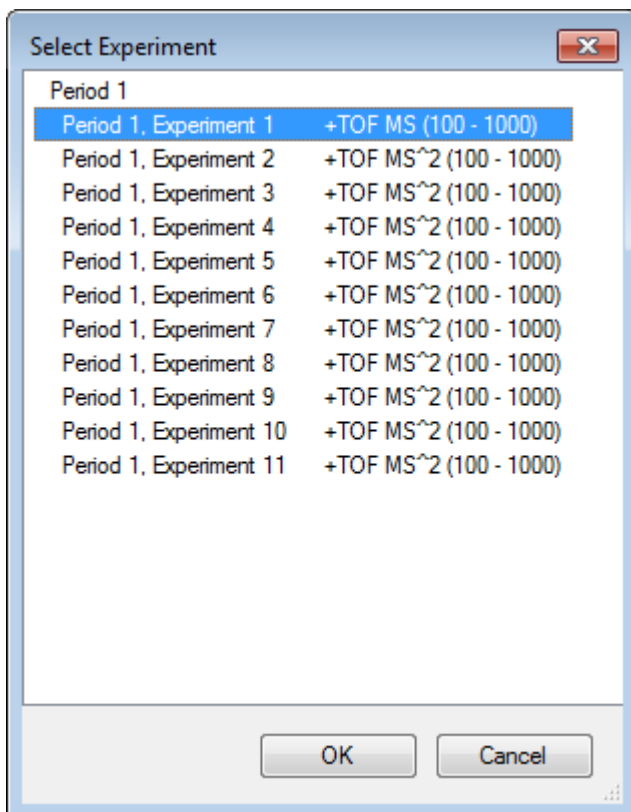
1. Fare clic su **File > Open Multiple Samples**.
2. Selezionare i file da **DataSet61.wiff** a **DataSet66.wiff** e spostarli nel pannello **Selected**.

Figura D-63: Più campioni selezionati



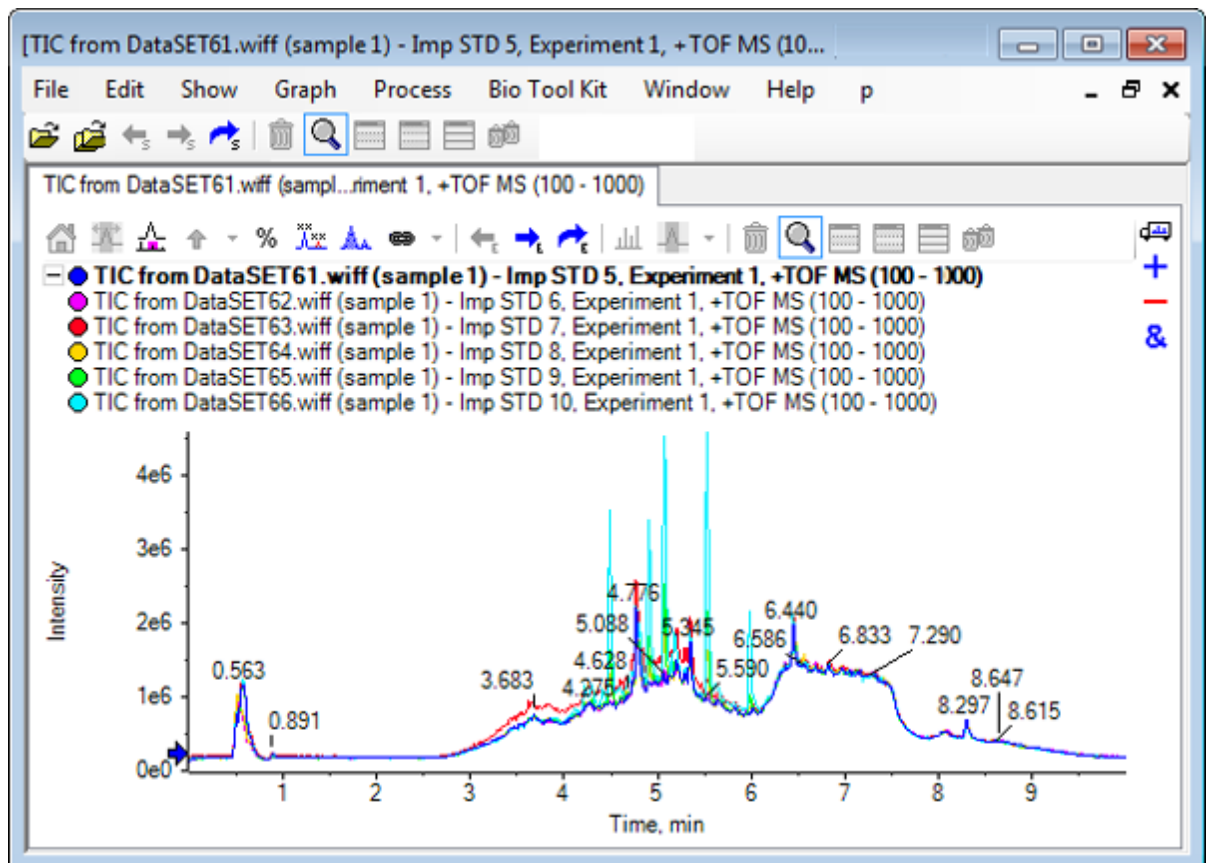
3. Fare clic su **OK**.
4. Fare clic su **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
5. Selezionare **Period 1, Experiment 1** dalla finestra di dialogo **Select Experiment**.

Figura D-64: Finestra di dialogo Select Experiment



6. Fare clic su **OK**.
7. Nella finestra di dialogo **Process All Overlays**, selezionare **All Overlaid** e fare clic su **OK**. Il grafico mostra la sovrapposizione di un cromatogramma TIC per ogni campione nel file.

Figura D-65: TIC sovrapposti da Experiment 1 di DataSet61.wiff fino a DataSet66.wiff



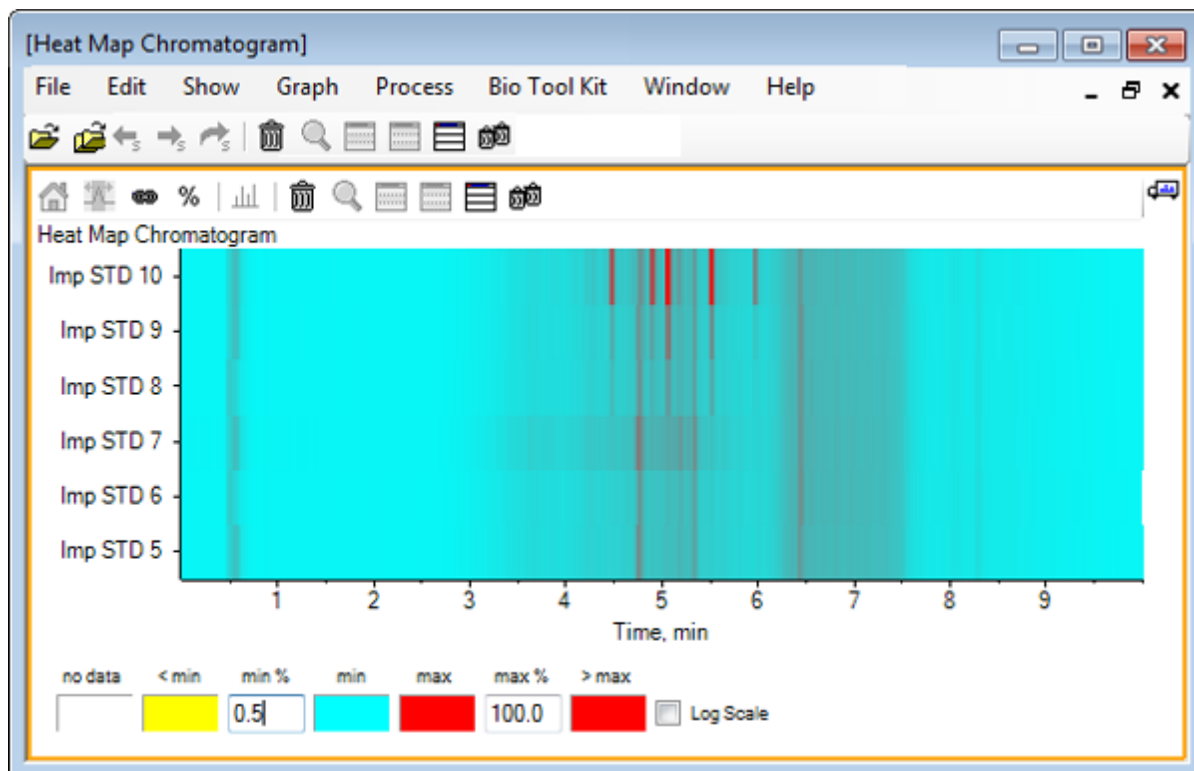
Il titolo della traccia attiva è mostrato in grassetto. Fare clic sull'icona a sinistra di questo titolo per comprimere le intestazioni in una singola riga, creando più spazio per le informazioni.

8. Fare clic su **Show > Overlaid Traces as Heat Map** e poi, nel riquadro risultante, impostare i colori dei controlli in modo che **min%** sia **0.5** e **max%** sia **100**.

Suggerimento! Fare clic con il pulsante destro del mouse e selezionare **Show Appearance Control** se i controlli non sono visibili.

9. Fare clic all'interno del riquadro del cromatogramma e quindi fare clic sull'icona **Nasconde tutti gli altri riquadri**.

Figura D-66: Heat Map Chromatogram



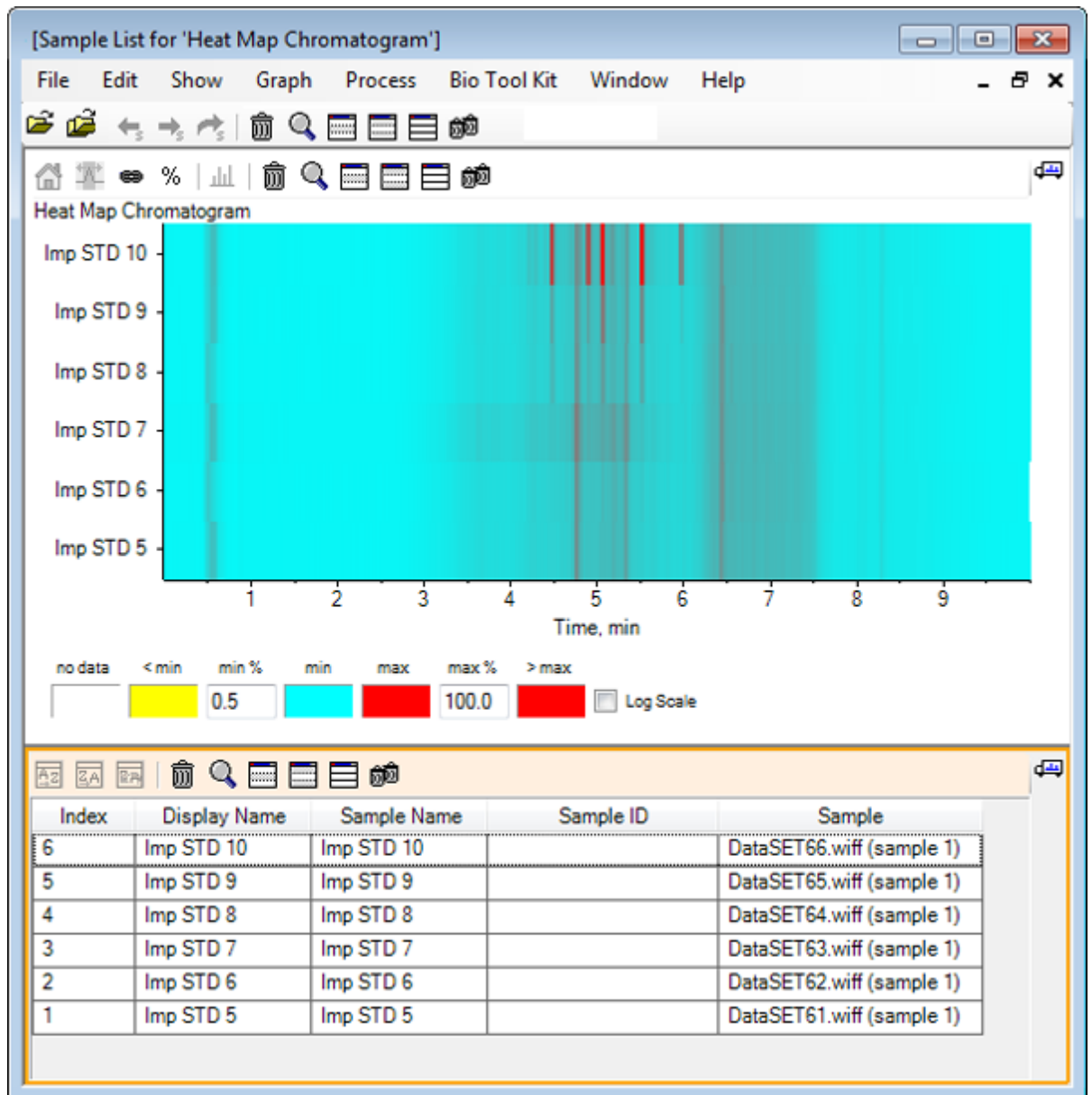
Ogni campione è rappresentato da una singola striscia orizzontale che mostra il suo TIC, identificato secondo un codice di colori basato sull'intensità. Utilizzando la combinazione di colori di cui sopra, il giallo rappresenta i punti dove nessun dato è stato acquisito o l'intensità è inferiore a 0,5% dell'intensità più grande in qualsiasi campione, il blu rappresenta lo 0,5% e il rosso rappresenta il segnale più intenso.

La finestra mostra da sei a sette picchi (tra 4.5 min e 6.5 min) e che le reazioni variano tranne per il picco a 6.5 min.

L'ordine dei picchi è lo stesso dei campioni che sono stati acquisiti e che potrebbero non essere perfetti. In questo esempio, l'ordine va bene.

10. Fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro e quindi fare clic su **Show Samples Table**. Inizialmente la tabella dei campioni viene visualizzata a destra della mappa termica. L'icona **Trascinare la selezione per riorganizzare i riquadri** nell'angolo superiore destro del riquadro può essere utilizzata per trascinare il riquadro in basso sulla mappa termica per spostare la tabella sotto il riquadro originale.

Figura D-67: Elenco di campioni per il cromatogramma della mappa termica

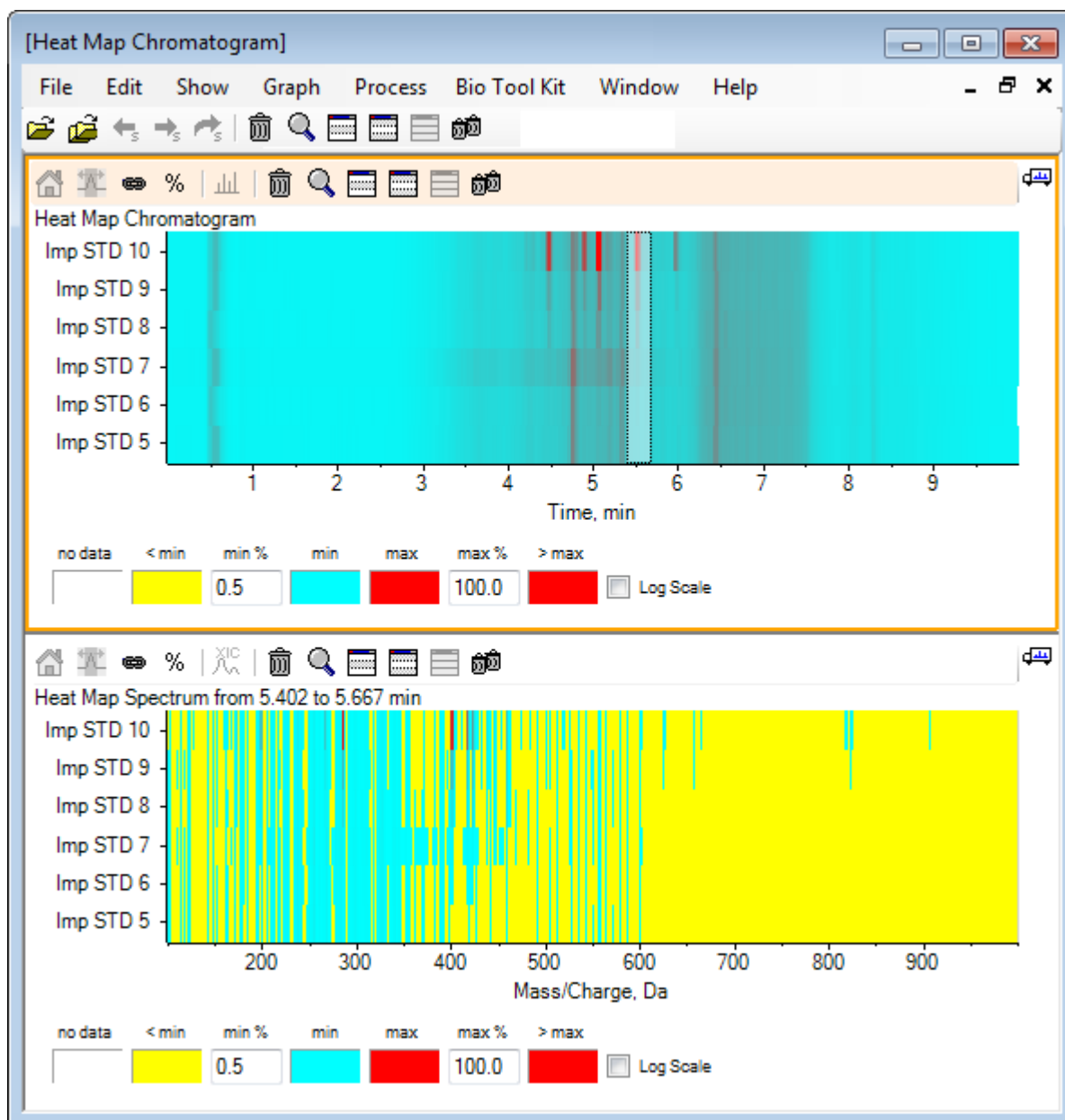


La tabella contiene colonne con vari campi di testo associati a ciascun campione. La colonna **Display Name** è modificabile, le altre sono di sola lettura. Tutte le colonne possono essere utilizzate per ordinare la visualizzazione della tabella e dei campioni.

11. Effettuare una selezione nella Imp STD 10 attorno a 5.5 min e quindi fare doppio clic all'interno di essa.

Viene creato un nuovo riquadro dello spettro della mappa termica e viene indicato l'intervallo di massa completo sull'asse x.

Figura D-68: Spettro della mappa termica



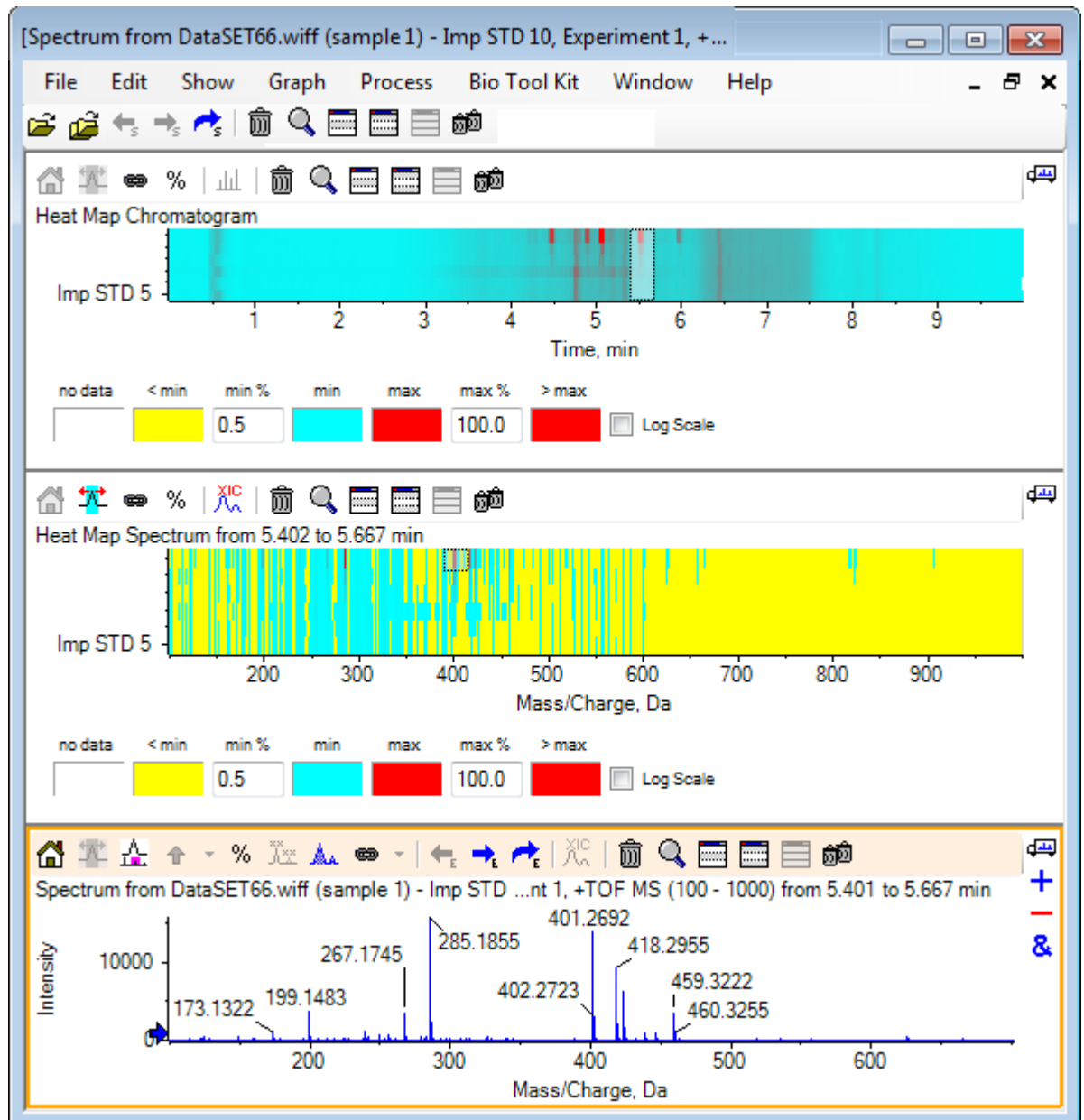
Dallo spettro, si può decidere che un paio di masse (tra un m/z di 400 e un m/z di 460) contribuiscano ad una maggiore intensità dell'area di tempo selezionata.

12. Selezionare la massa intorno a Mass/Charge Da 401 per il campione Imp STD 10 e quindi fare clic con il pulsante destro del mouse per selezionare **Show Spectra for Selected Samples**.

Si crea così uno spettro per il campione selezionato. È indicato lo spettro in quel punto temporale. Fare riferimento alla [Figura D-69](#).

13. Fare doppio clic sulla massa intorno a Mass/Charge Da 401 nello spettro della mappa termica per creare una mappa termica XIC.

Figura D-69: Spettro



Riepilogo

In questa sezione sono state trattate le seguenti attività:

- Lavorare con gli strumenti campioni multipli disponibili nel software.
- Confrontare due campioni con cromatogrammi sovrapposti e spettri interattivi.
- Confronto di più campioni con visualizzazioni di mappe termiche.

Lavorare con la funzione Bio Tool Kit

In questa sezione vengono illustrate alcune delle opzioni disponibili nell'elemento di menu **Bio Tool Kit** del software.

Nota: Deve essere attivata la funzione Bio Tool Kit MicroApp per accedere a questa funzionalità. Fino a quando non viene completata l'attivazione, le uniche opzioni disponibili sono Peptide Fragments, Add Manual Reconstruct Highlights e Remove Manual Reconstruct Highlights. Fare riferimento alla funzione Activate Bio Tool Kit MicroApp nel documento *Note di rilascio*.

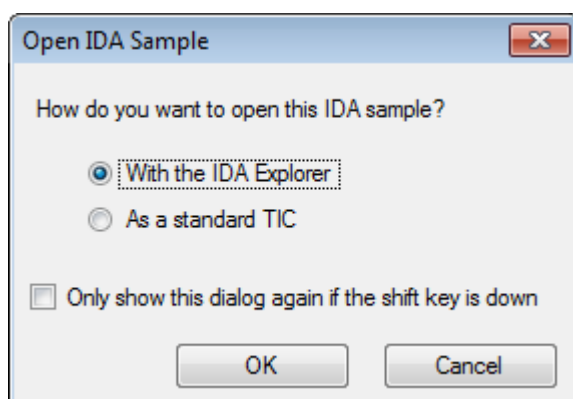
Sequenza manuale

Utilizzare questa opzione per ordinare manualmente dati spettrali MS/MS da un campione di proteine digerito.

1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale.
Si aprirà la finestra di dialogo **Select Sample**.
2. Se la cartella **Sample Data** non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**.
3. Selezionare il file **RP_digests.wiff** e fare clic su **OK**.

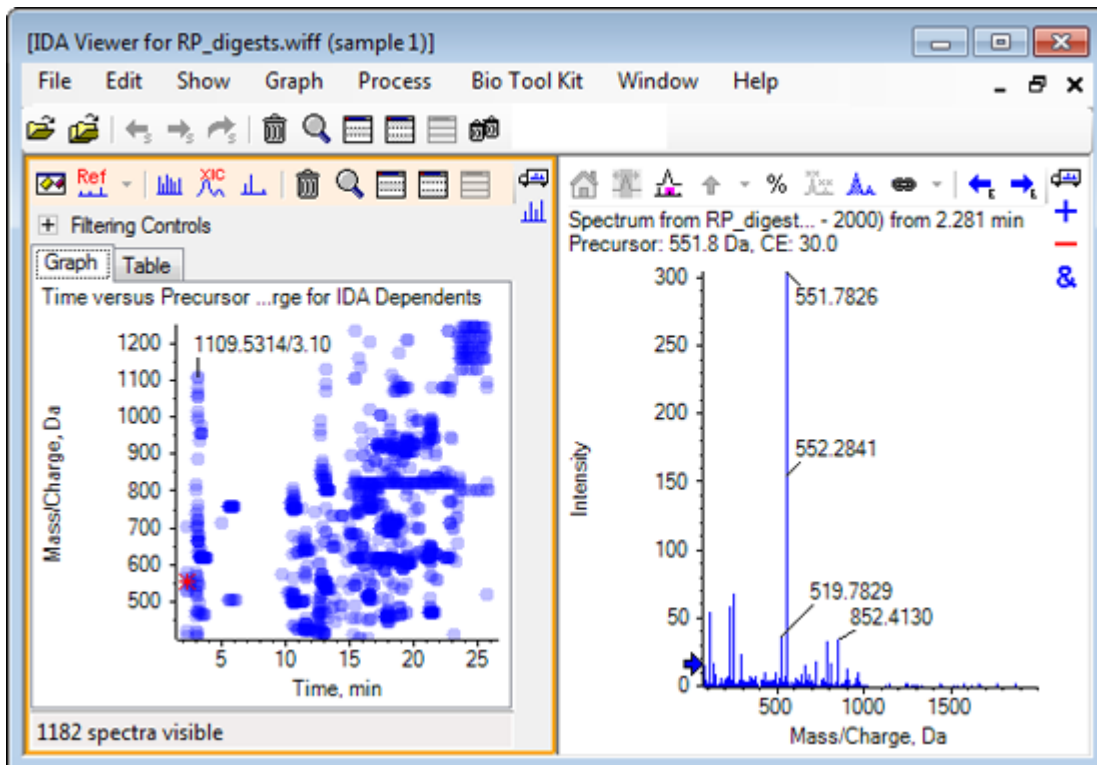
Si aprirà la finestra di dialogo **Open IDA Sample**.

Figura D-70: Finestra di dialogo Open IDA Sample



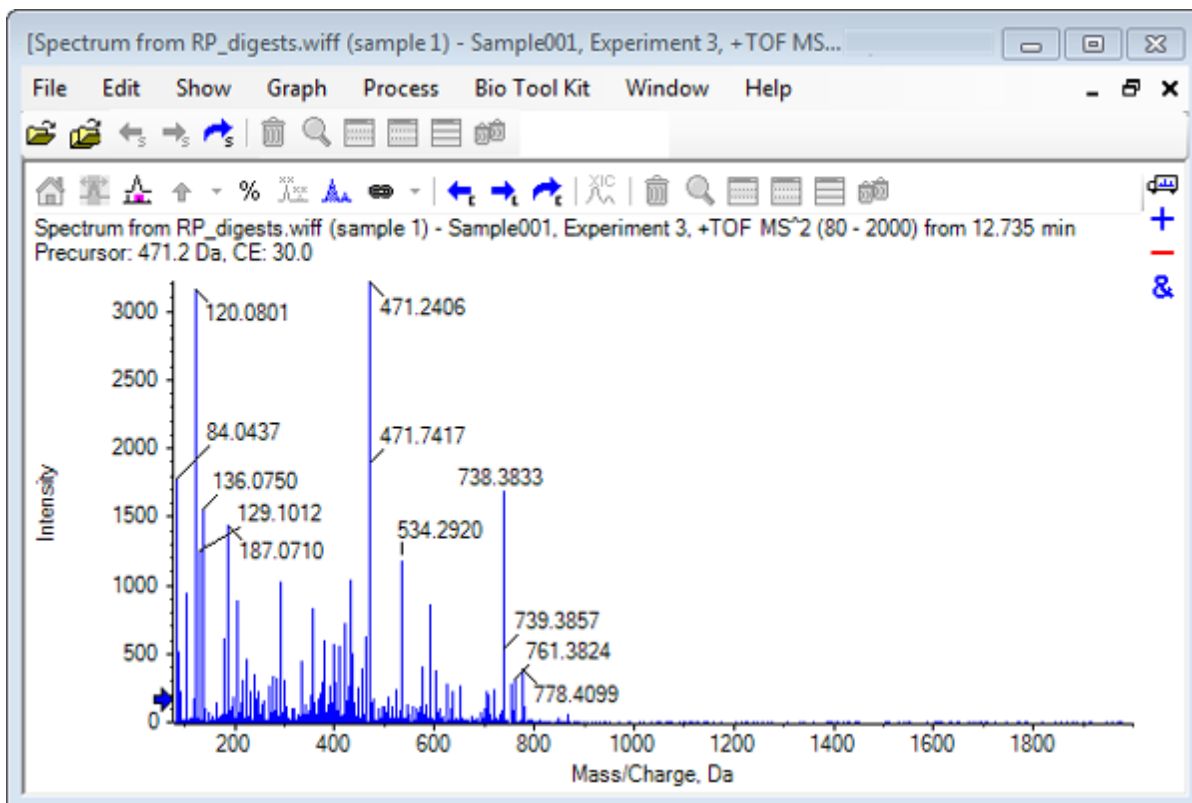
4. Assicurarsi che l'opzione **With the IDA Explorer** sia selezionata e quindi fare clic su **OK**.

Figura D-71: Spettro da RP_digests.wiff



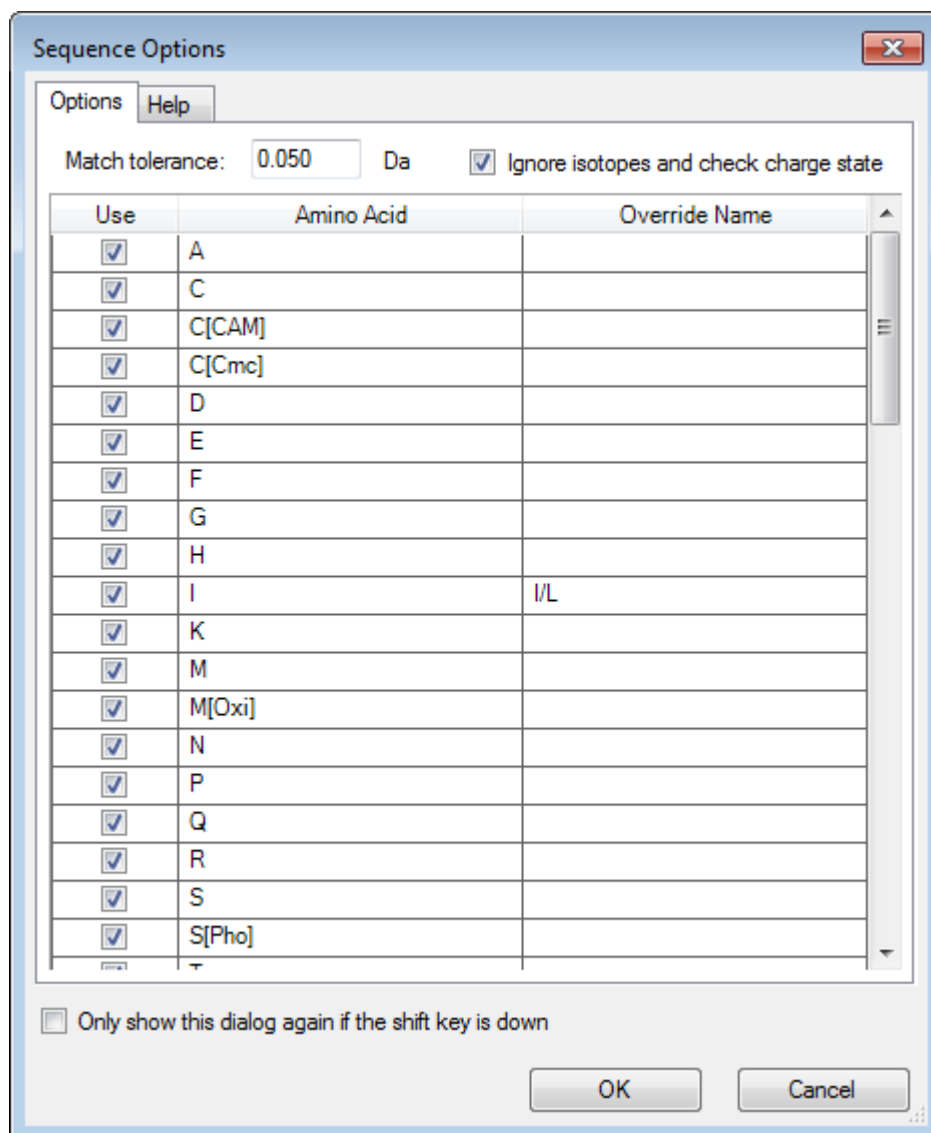
5. Fare clic sulla scheda **Table**.
6. Selezionare **m/z** 471.2398 al **Time** 12.73.
7. Col riquadro Spectrum attivo, fare clic su **Graph > Duplicate Graph**.
Si apre un nuovo riquadro Spectrum per il precursore selezionato (471.2). È possibile eliminare il riquadro IDA Explorer e il suo riquadro associato Spectrum.

Figura D-72: Spettro per precursore 471.2398 al tempo di ritenzione 12.73



8. Selezionare il picco etichettato con **738.3833**.
9. Fare clic su **Bio Tool Kit > Manual Sequence**.
Si apre la finestra di dialogo **Sequence Options**.

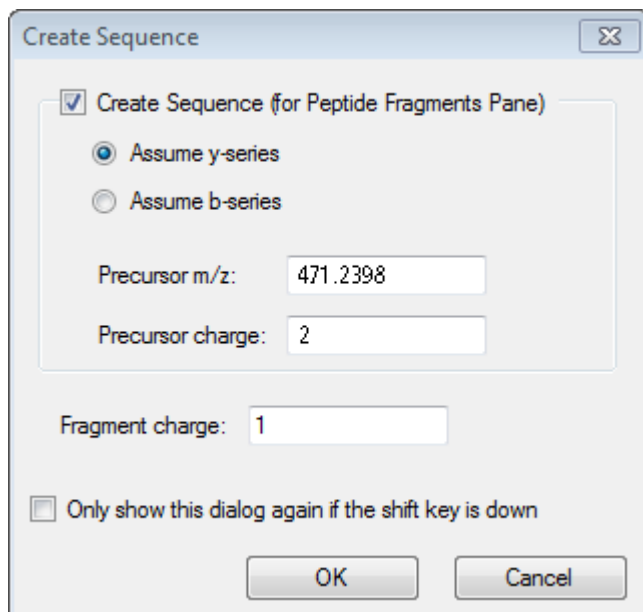
Figura D-73: Finestra di dialogo Sequence Options



Nota: Quando si seleziona la casella di controllo per Ignore isotopes and check charge state, gli isotopi ed eventuali picchi con stato di carica errato sono ignorati dal software quando si propone l'amminoacido successivo.

10. Fare clic su **OK**.
Si apre la finestra di dialogo **Create Sequence**.

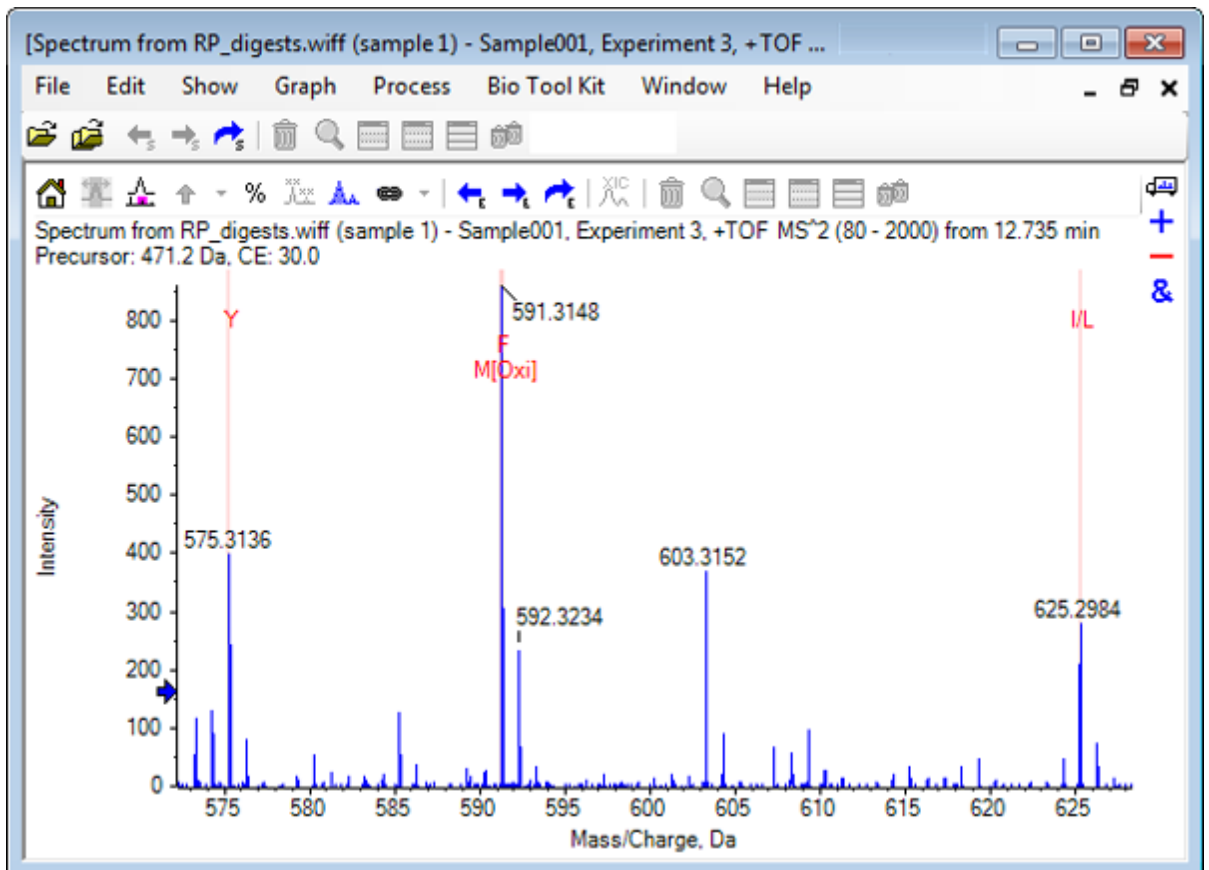
Figura D-74: Finestra di dialogo Create Sequence



Nota: Questa finestra di dialogo consente all'utente di modificare le ipotesi fatte per gli ioni delle serie y e b e lo stato di carica dopo che il file è ordinato manualmente, e di vedere quale ipotesi fornisce la corrispondenza migliore per i dati.

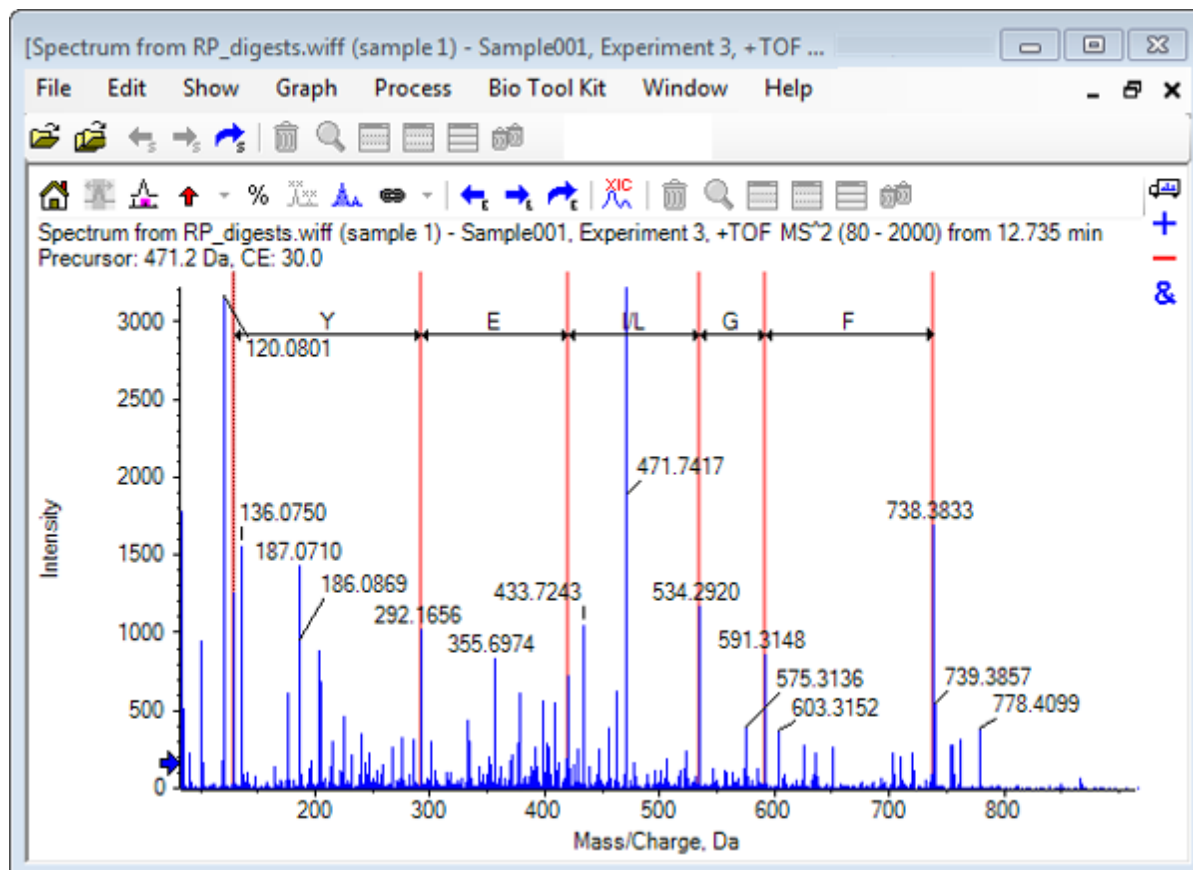
11. Assicurarsi che la casella di controllo **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** sia selezionata.
12. Digitare **2** nel campo **Precursor charge**.
13. Digitare il valore di carica del picco selezionato per proseguire l'albero di sequenza manuale nel campo **Fragment charge**.
14. Fare clic su **OK**.
Il software si aggiorna, mostrando un riquadro aggiornato Spectrum con linee verticali rosse che indicano il primo set di possibili amminoacidi guadagnati o persi sui dati spettrali.

Figura D-75: Spettro ordinato manualmente — Possibilità iniziali



15. Fare doppio clic sulla didascalia della linea verticale rossa da ordinare ulteriormente. Il software si aggiorna, indicando il set successivo di amminoacidi sui dati spettrali.
16. Ripetere il passaggio 15 fino a quando siano stati suggeriti tutti i possibili amminoacidi.

Figura D-76: Spettro ordinato manualmente



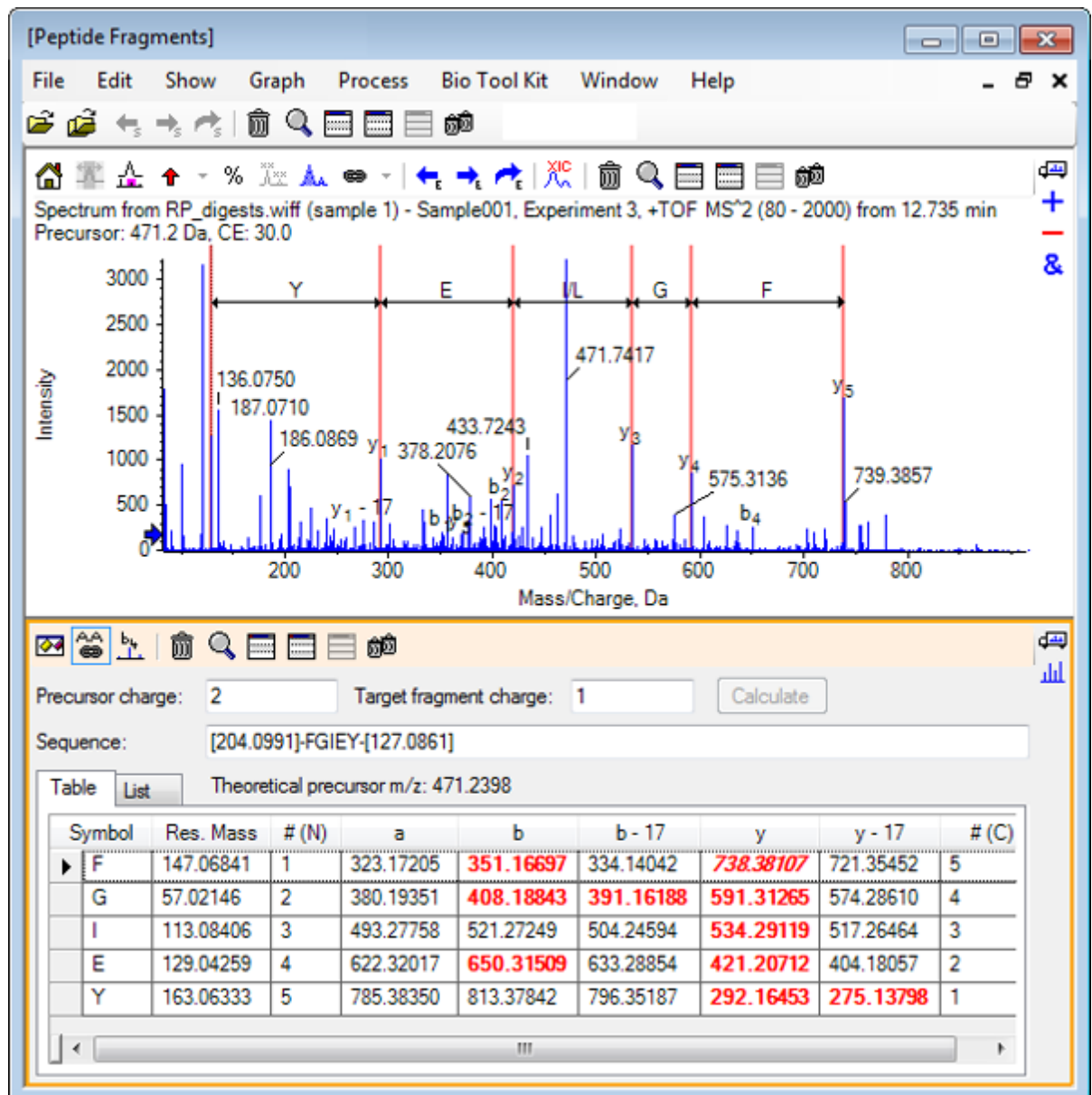
Nota: In [Figura D-76](#), si fa clic sulle didascalie nel seguente ordine: F > G > I/L > E > Y.

Suggerimento! Se il software suggerisce più di una possibilità e si desidera seguire un ramo diverso da quello suggerito inizialmente, riportare il grafico alla visualizzazione iniziale e ripetere questa procedura selezionando un'etichetta di amminoacido corrispondente alternativa.

Ordine manuale collegato con frammenti peptidi

1. Fare clic su **Bio Tool Kit > Peptide Fragments**.
Si apre il riquadro Peptide Fragments collegato con lo spettro ordinato manualmente.

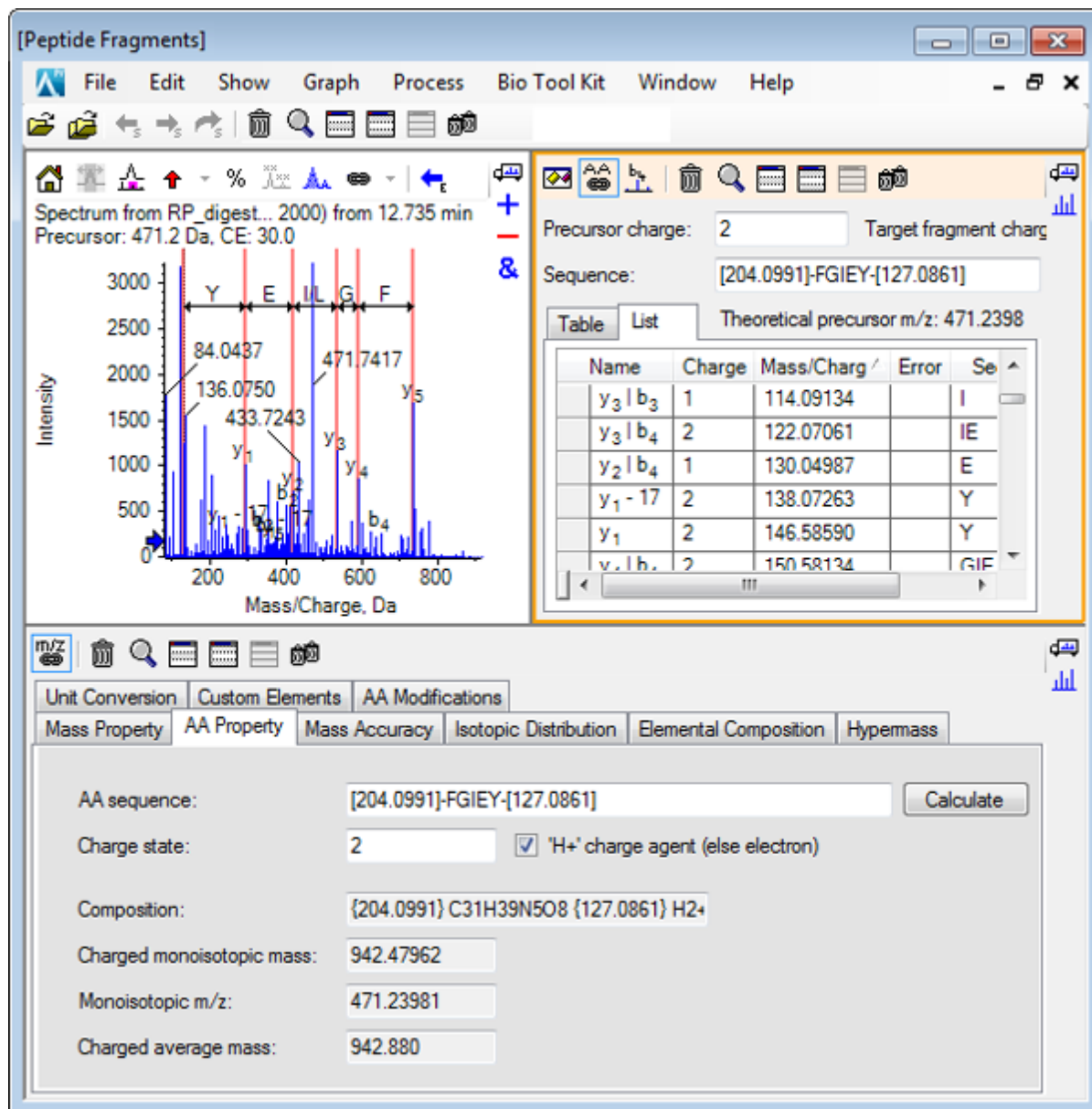
Figura D-77: Riquadro Peptide Fragments collegato con lo spettro ordinato manualmente



Nota: Gli amminoacidi che corrispondono ai dati sperimentali sono mostrati in grassetto in rosso nelle colonne della scheda Table. Gli amminoacidi che corrispondono ai dati sperimentali, ma che hanno una differente destinazione di carica del frammento, sono mostrati in corsivo in rosso nelle colonne della scheda Table.

2. Fare clic sulla scheda **List**.
3. Fare clic su **Show > Mass Calculators**.
4. Fare clic sulla scheda **AA Property**.

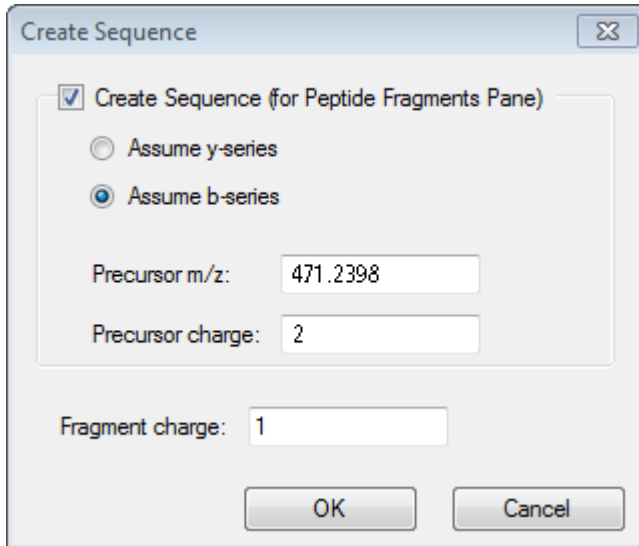
Figura D-78: Calcolatori di massa - Scheda AA Property



Nota: I calcolatori di massa vengono automaticamente collegati allo spettro ordinato manualmente come da impostazione predefinita. La sequenza degli amminoacidi dallo spettro è mostrato nel campo **AA sequence**.

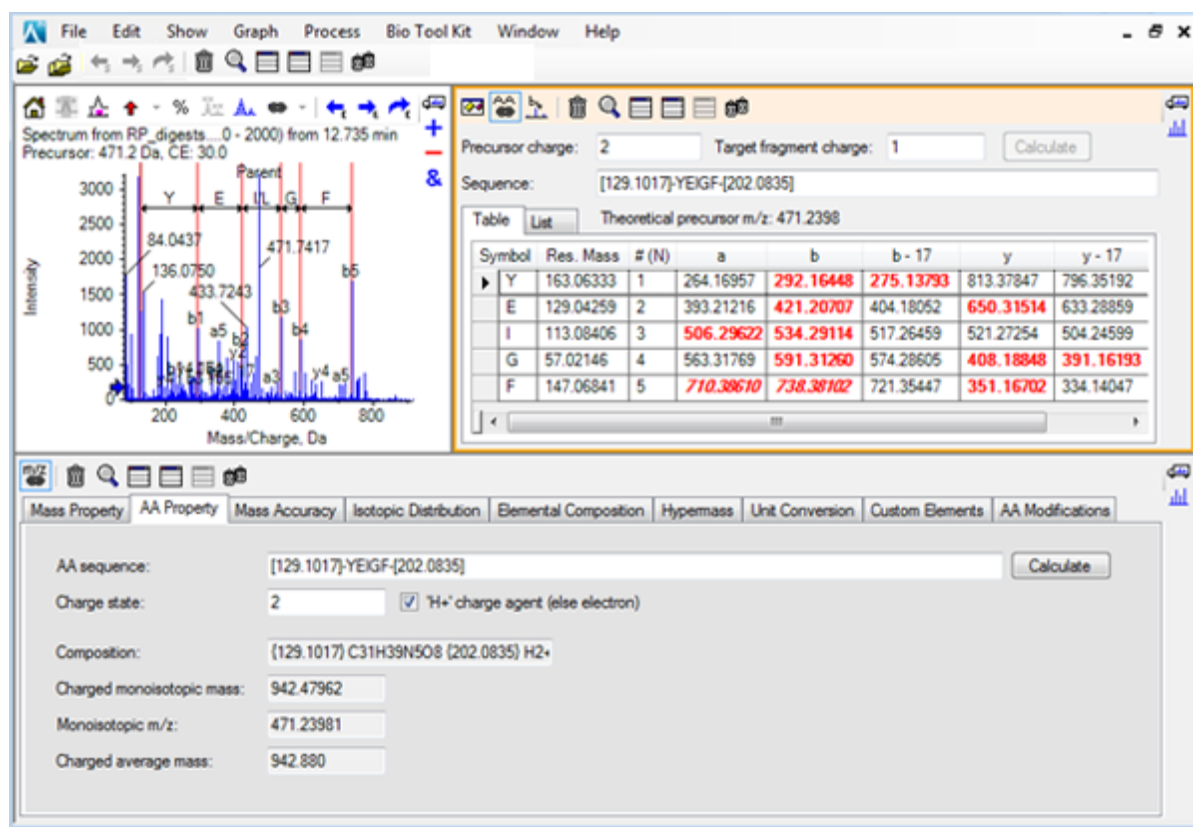
- Con il riquadro Spectrum attivo, fare clic su **Bio Tool Kit > Set Sequence Creation Parameters**.
Si apre la finestra di dialogo **Create Sequence**.

Figura D-79: Finestra di dialogo Create Sequence



6. Completare la finestra di dialogo **Create Sequence** come segue:
 - Assicurarsi che la casella di controllo **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** sia selezionata.
 - Selezionare l'opzione **Assume b-series**.
 - Digitare **471.2398** nel campo **Precursor m/z**.
 - Digitare **2** nel campo **Precursor charge**.
 - Digitare **1** nel campo **Fragment charge**.
7. Fare clic su **OK**.
Il riquadro Peptide Fragments e il riquadro Mass Calculators si aggiornano con i dati di sequenza aggiornati.
8. Fare clic sulla scheda **Table** nel riquadro **Peptide Fragments**.

Figura D-80: Aggiornamento del riquadro Refreshed Peptide collegato con lo spettro ordinato manualmente



9. Con il riquadro Spectrum attivo, fare clic su **Bio Tool Kit > Clear Manual Sequencing**. Tutti i segni di sequenza manuale vengono rimossi.

Aggiungere e rimuovere i punti chiave ricostruiti manualmente

Utilizzare l'opzione **Add Manual Reconstruct Highlights** per aggiungere i marcatori che indicano le posizioni teoriche di m/z tra una data massa e uno spettro. Questa funzione è utile per confermare o meno se picchi particolari in uno spettro corrispondono allo stesso componente quando gli spettri contengono componenti multicarica. Utilizzare l'opzione **Remove Manual Reconstruct Highlights** per rimuovere i marcatori.

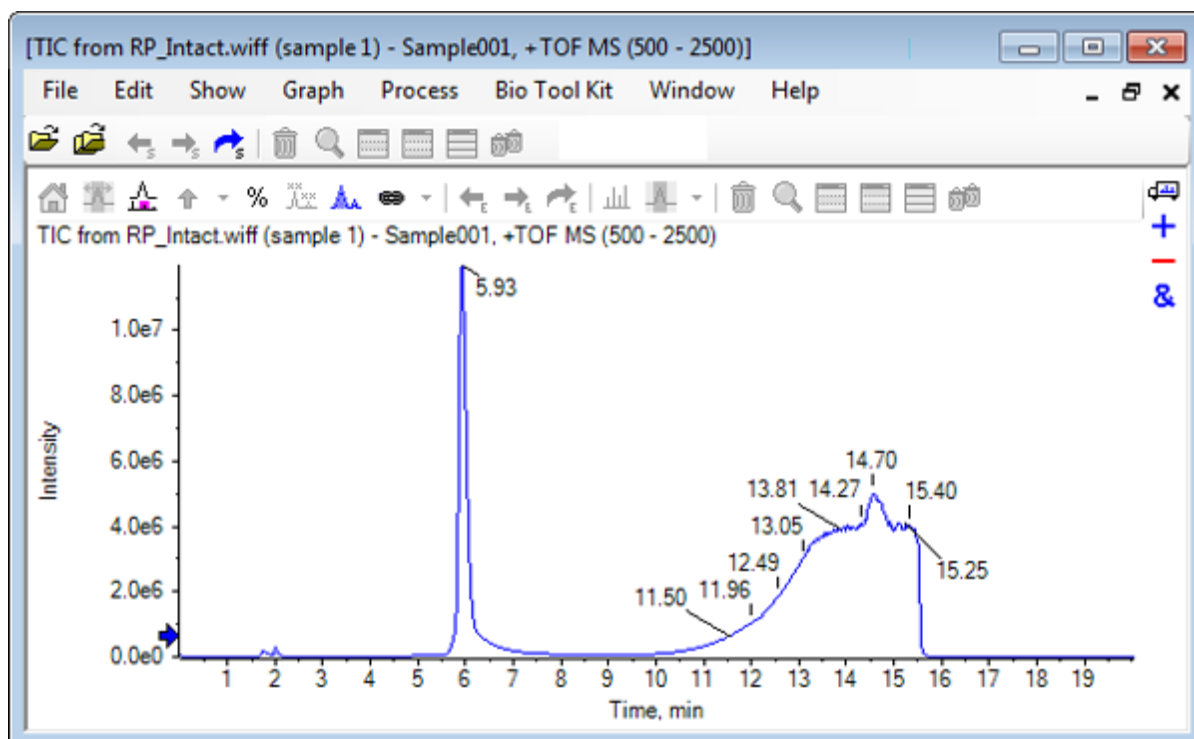
Suggerimento! Trascinare la linea verticale del marcatore su un nuovo valore di m/z per spostare il marcatore in una nuova posizione.

Suggerimento! Fare clic sulla linea verticale del marcatore o dell'etichetta dello stato di carica corrispondente per rendere attivo il marcatore. Il marcatore attivo mostra la posizione di m/z .

1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale. Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.

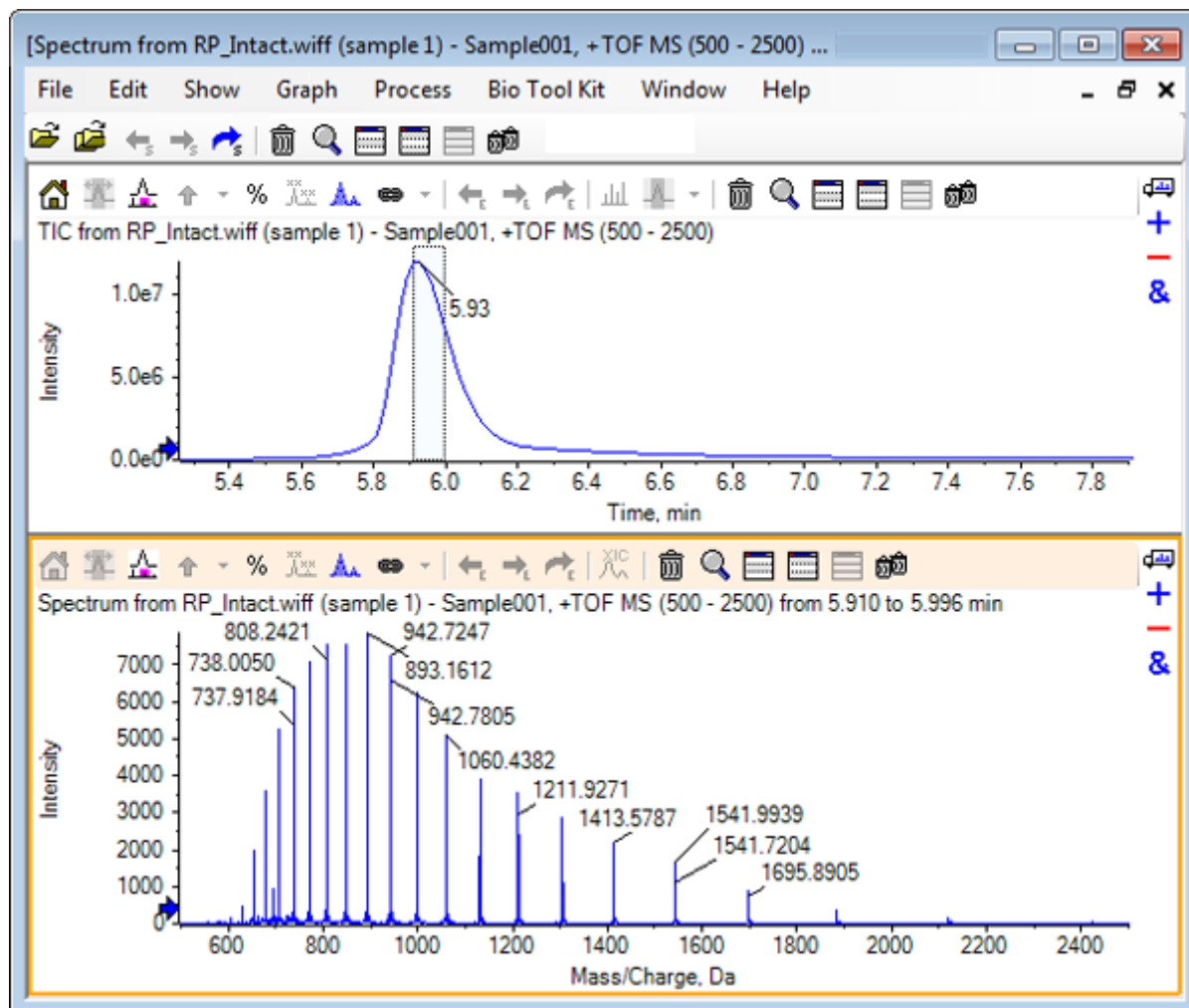
2. Se la cartella **Sample Data** non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**.
3. Selezionare il file **RP_Intact.wiff** e fare clic su **OK**.

Figura D-81: TIC dal file RP_Intact.wiff



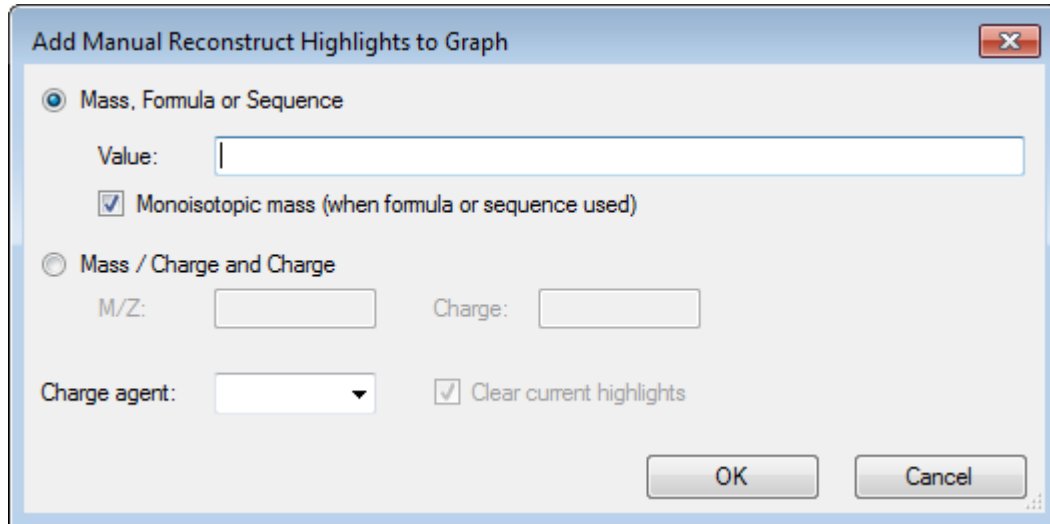
4. Creare uno spettro medio utilizzando l'area superiore (da 5.91 a 6.00 min) del picco per la mioglobina.

Figura D-82: Spettro medio



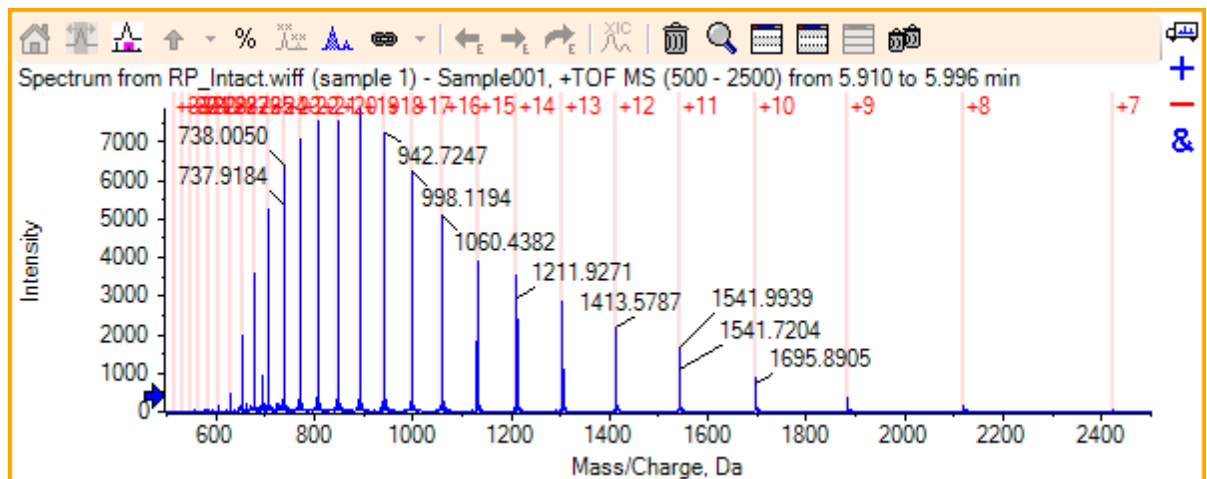
5. Con il riquadro Spectrum attivo, fare clic su **Bio Tool Kit > Add Manual Reconstruct Highlights**.
Si apre la finestra di dialogo **Add Manual Reconstruct Highlights to Graph**.

Figura D-83: Add Manual Reconstruct Highlights to Graph



6. Digitare **16950** nel campo **Value**.
7. Selezionare **H+** come **Charge agent** e poi fare clic su **OK**.
Il grafico viene aggiornato e contiene i punti chiave.

Figura D-84: Spettro con punti chiave aggiunti



8. Fare clic su **Bio Tool Kit > Remove Manual Reconstruct Highlights** per rimuovere i marcatori.
Il grafico viene aggiornato con i punti chiave rimossi.




Proteina digerita

Utilizzare questa opzione per ottenere informazioni sulle sequenze peptidiche teoriche derivanti dalla scissione enzimatica definita dall'utente di una specifica proteina.

Barra degli strumenti

Utilizzare le icone nella barra degli strumenti per regolare la visualizzazione come richiesto.

Tabella D-5: Icone della barra degli strumenti

Icona	Nome (Suggerimento)
	Trovare e sostituire in sequenza
	Convertire selezione in maiuscolo
	Trovare sequenza

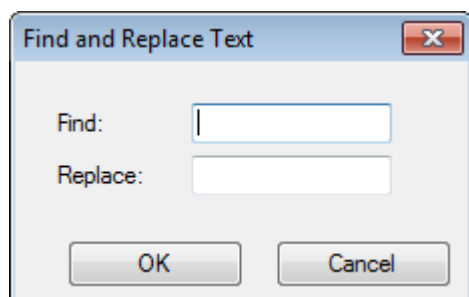
Nota: Le ultime sei icone in questa barra degli strumenti, a cominciare dall'icona Elimina questo riquadro, sono descritte in [Barra degli strumenti del riquadro generico](#).

Trovare e sostituire in sequenza

Utilizzare questa opzione per trovare un testo esistente nel campo **Sequence** e sostituirlo con il nuovo testo.

1. Fare clic sull'icona **Trovare e sostituire in sequenza**.
Si apre la finestra di dialogo **Find and Replace Text**.

Figura D-85: Finestra di dialogo Find and Replace Text



2. Digitare le informazioni da sostituire nel campo **Find**.
3. Digitare le informazioni appropriate nel campo **Replace**.
4. Fare clic su **OK**.
Il software sostituisce il testo esistente con testo di sostituzione specificato dall'utente.

Convertire selezione in maiuscolo

Utilizzare questa opzione per convertire il testo digitato nel campo **Sequence** da carattere minuscolo a maiuscolo.

1. Selezionare il testo appropriato.
2. Fare clic sull'icona **Convertire selezione in maiuscolo**.

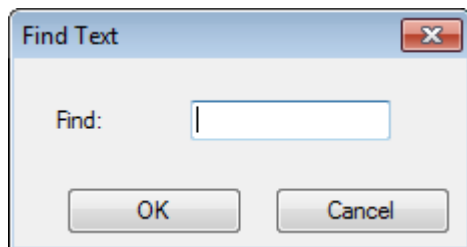
Il software sostituisce il testo in caratteri minuscoli con lo stesso testo in caratteri maiuscoli.

Trovare sequenza

Utilizzare questa opzione per trovare un testo nel campo **Sequence**.

1. Fare clic sull'icona **Trovare sequenza**.
Si apre la finestra di dialogo **Find Text**.

Figura D-86: Finestra di dialogo Find Text

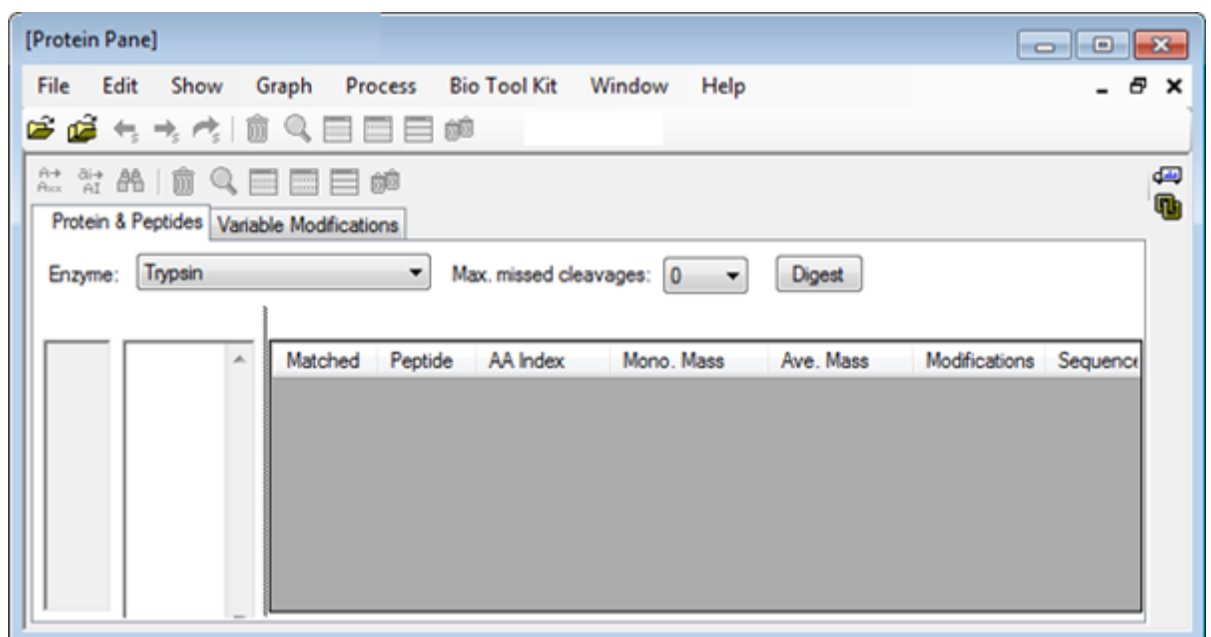


2. Digitare le informazioni appropriate nel campo **Find**.
3. Fare clic su **OK**.
Il software evidenzia il testo corrispondente.

Digestione teorica della proteina

1. Fare clic su **Bio Tool Kit > Digest Protein**.
Si apre il riquadro **Protein**.

Figura D-87: Protein Pane - Scheda Protein & Peptides



2. Digitare una sequenza di proteine o di peptidi nel campo fornito.

Esercitazione per Explorer

Nota: Per questa esercitazione, è stata utilizzata GLSDGEWQQV
LNVWGKVEAD IAGHGQEVLI RLFTGHPETL EKFDKFKHLK TEAEMKASED
LKKHGTVVLT ALGGILKKKG HHEAELKPLA QSHATKHKIP IKYLEFISDA IIVLHSHKHP
GDFGADAQGA MTKALELFRN DIAAKYKELG FQG (sequenza di mioglobina).

3. Selezionare un **enzima**.
-

Nota: Per questa esercitazione, è stata selezionata la Tripsina.

4. Selezionare **Max. missed cleavages**.
-

Nota: Per questa esercitazione, è stato selezionato 0.

5. Fare clic su **Digest**.
Il software compila la tabella con informazioni teoriche sui peptidi digeriti e sulle relative sequenze.

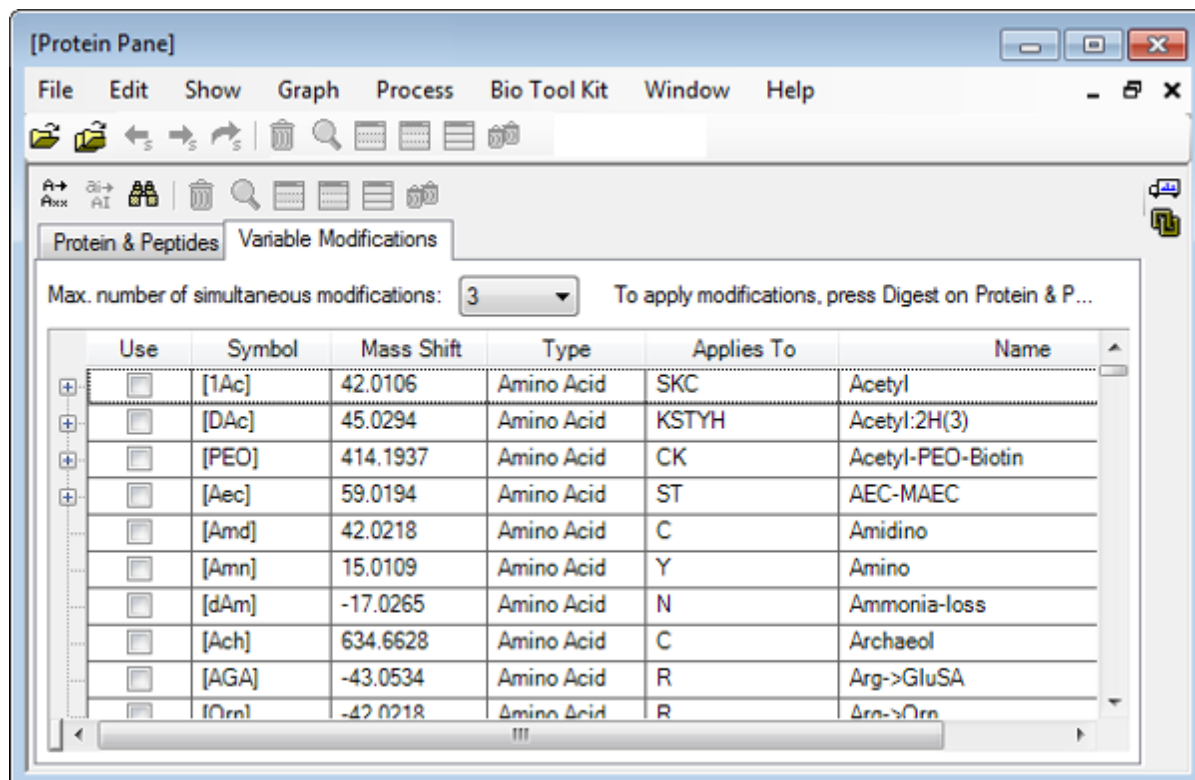
Figura D-88: Protein Pane compilato con informazioni teoriche

The screenshot shows the 'Protein Pane' window with the 'Variable Modifications' tab selected. The enzyme is set to 'Trypsin' and 'Max. missed cleavages' is set to '0'. The 'AA selection' is '(None)'. A list of peptides is shown on the left, and a table of matched peptides is on the right.

Matched	Peptide	AA Index	Mono. Mass	Ave. Mass	Modifications	Sequence
<input checked="" type="checkbox"/>	T1	1 - 16	1814.89515	1816.004		GLSDGEWQ...
<input checked="" type="checkbox"/>	T2	17 - 31	1605.84747	1606.799		VEADIAGHG...
<input checked="" type="checkbox"/>	T3	32 - 42	1270.65575	1271.436		LFTGHPETLEK
<input checked="" type="checkbox"/>	T4	43 - 45	408.20088	408.455		FDK
<input checked="" type="checkbox"/>	T5	46 - 47	293.17394	293.366		FK
<input checked="" type="checkbox"/>	T6	48 - 50	396.24850	396.490		HLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T7	51 - 56	707.31599	707.801		TEAEMK
<input checked="" type="checkbox"/>	T8	57 - 62	661.32827	661.710		ASEDLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T9	63	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T10	64 - 77	1377.83439	1378.679		HGTVLTLA...
<input checked="" type="checkbox"/>	T11	78	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T12	79	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T13	80 - 96	1852.95440	1854.056		GHHEAELKP...
<input checked="" type="checkbox"/>	T14	97 - 98	283.16444	283.331		HK
<input checked="" type="checkbox"/>	T15	99 - 102	469.32642	469.625		IPIK
<input checked="" type="checkbox"/>	T16	103 - 118	1884.01454	1885.194		YLEFISDAIHH...
<input checked="" type="checkbox"/>	T17	119 - 133	1501.66198	1502.626		HPGDFGADA...
<input checked="" type="checkbox"/>	T18	134 - 139	747.42793	747.893		ALELFR
<input checked="" type="checkbox"/>	T19	140 - 145	630.33369	630.699		NDIAAK
<input checked="" type="checkbox"/>	T20	146 - 147	309.16886	309.365		YK
<input checked="" type="checkbox"/>	T21	148 - 153	649.30714	649.701		ELGFQG

- Fare clic sulla scheda **Variable Modifications**.

Figura D-89: Protein Pane - Scheda Variable Modifications



7. Selezionare un **Max. number of simultaneous modifications**.

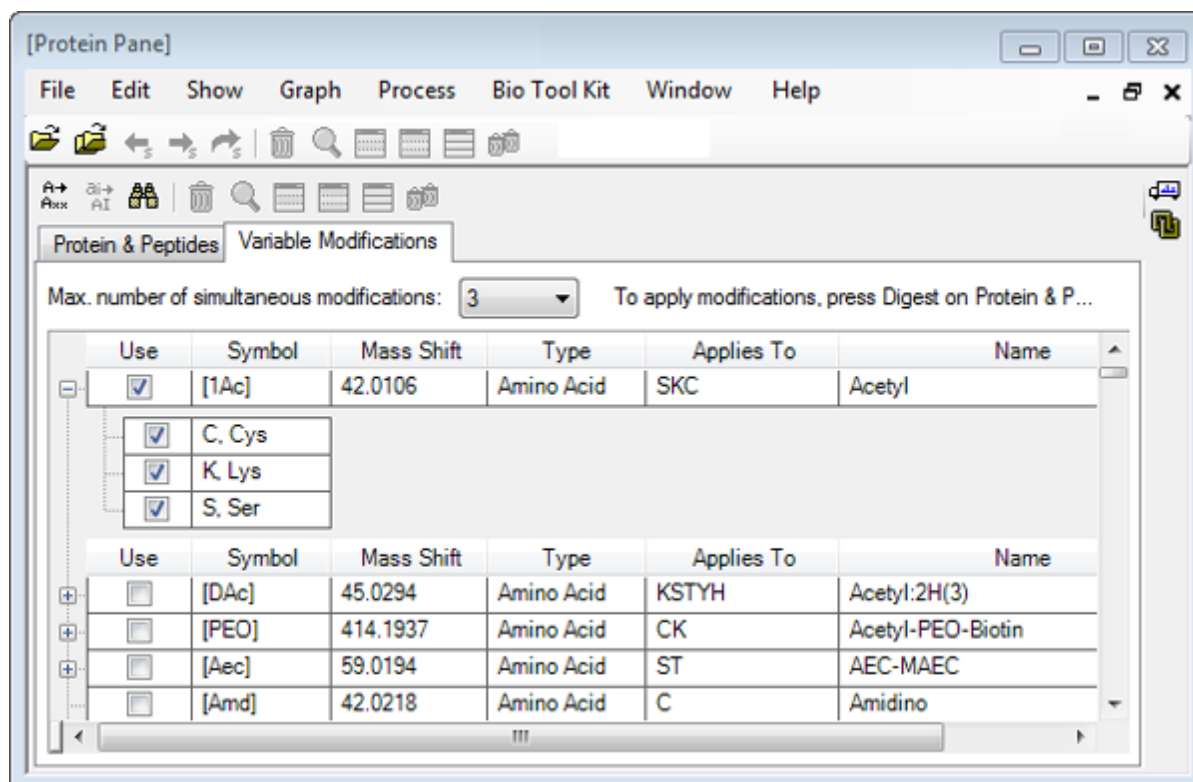
Nota: Per questa esercitazione, è stato selezionato 3.

8. Selezionare la casella di controllo nella colonna **Use** per le modifiche appropriate.

Suggerimento! Se un'icona è mostrata alla sinistra della casella di controllo, è possibile selezionare l'intero elenco di amminoacidi o solo quelli che sono applicabili.

Nota: Per questa esercitazione, è stata selezionata la casella di controllo per [1Ac].

Figura D-90: Esempio di modifiche selezionate

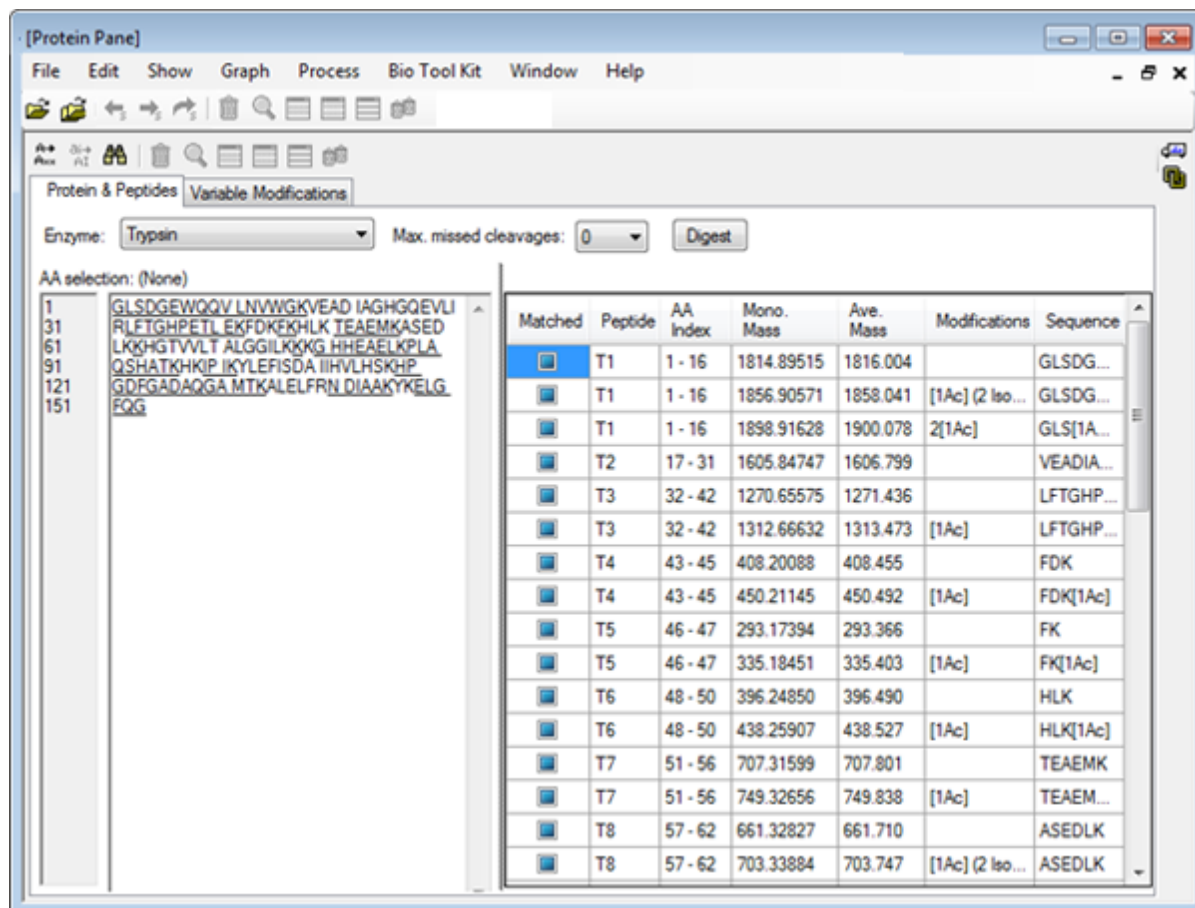


9. Fare clic sulla scheda **Protein & Peptides**.

10. Fare clic su **Digest**.

I risultati nella tabella sono modificati per rispecchiare le selezioni eseguite dall'utente.

Figura D-91: Protein Pane compilato con informazioni modificate

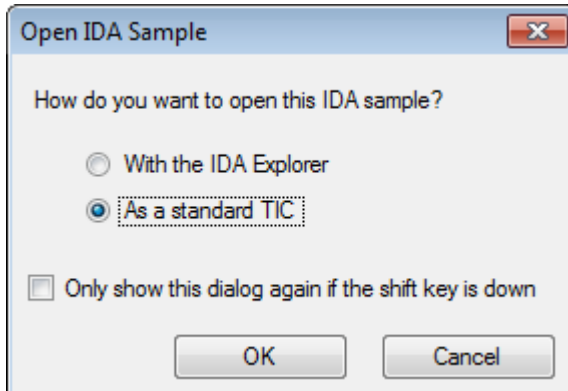


Ricostruzione peptide cromatografia liquida a spettrometria di massa (LCMS)

La ricostruzione peptide LCMS identifica i picchi spettrali ed esegue la deconvoluzione dai picchi spettrali identificati. Lo strumento di ricostruzione peptide LCMS funziona in due fasi. In primo luogo, i picchi si trovano utilizzando l'algoritmo di ricerca del picco "Enhance". In secondo luogo, lo strumento trova i gruppi dei picchi che formano le serie di isotopi e di carica e segnala la massa neutra di tutti i componenti trovati.

1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale. Si aprirà la finestra di dialogo **Select Sample**.
2. Se la cartella Sample Data non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**.
3. Selezionare il file **RP_digests.wiff** e fare clic su **OK**.
Si aprirà la finestra di dialogo **Open IDA Sample**.

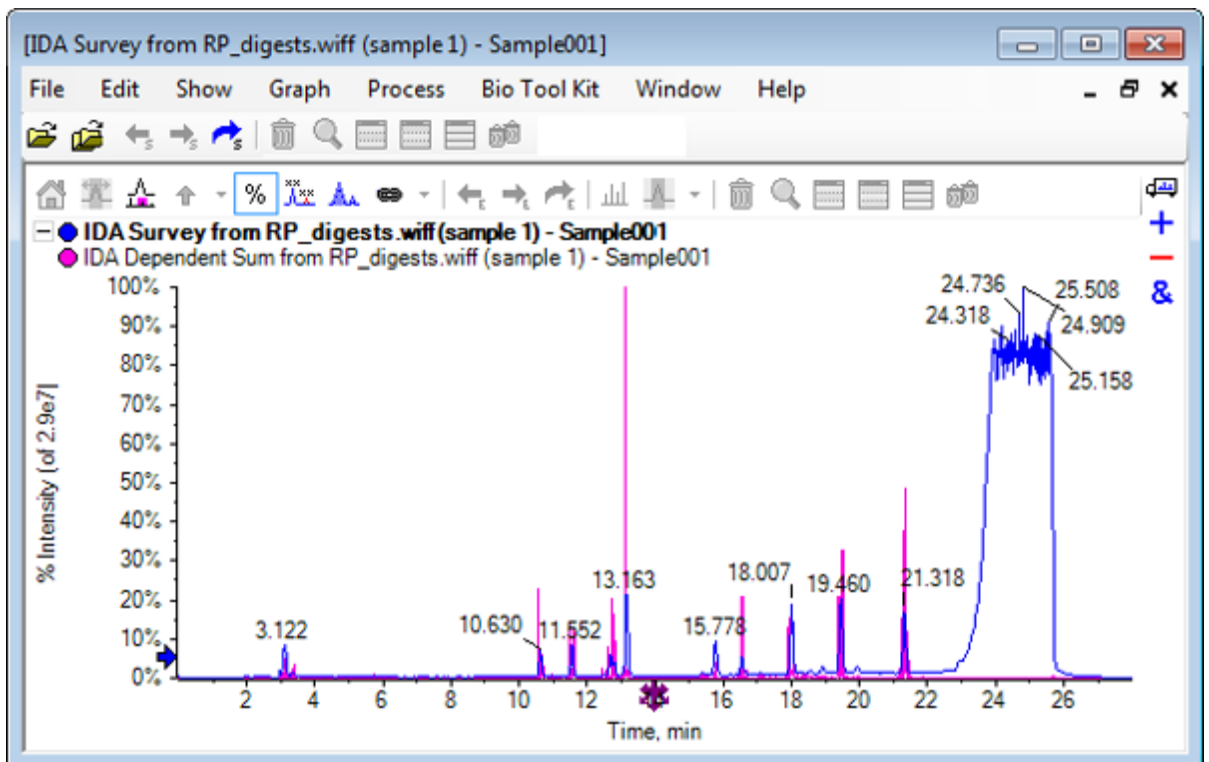
Figura D-92: Finestra di dialogo Open IDA Sample



- Assicurarsi che l'opzione **As a standard TIC** sia selezionata e quindi fare clic su **OK**.

Assicurarsi che la prima traccia, **IDA Survey from RP_digests.wiff (sample 1) - Sample001**, sia mostrata in grassetto. Se necessario, selezionare questa traccia.

Figura D-93: IDA Survey from RP_digests.wiff



- Fare clic su **Bio Tool Kit > LCMS Peptide Reconstruct (with peak finding)**. Si apre la finestra di dialogo **LCMS Peptide Reconstruct Options**.

Figura D-94: Finestra di dialogo 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. Digitare i seguenti valori nei campi specificati:

- **9.00** min nel campo **Minimum retention time**
- Selezionare la casella di controllo **Maximum retention time** e digitare **16.00** nel campo
- **6.0** sec nel campo **Approximate LC peak width**

Nota: La larghezza approssimativa del picco viene utilizzata per determinare l'offset durante la sottrazione del fondo.

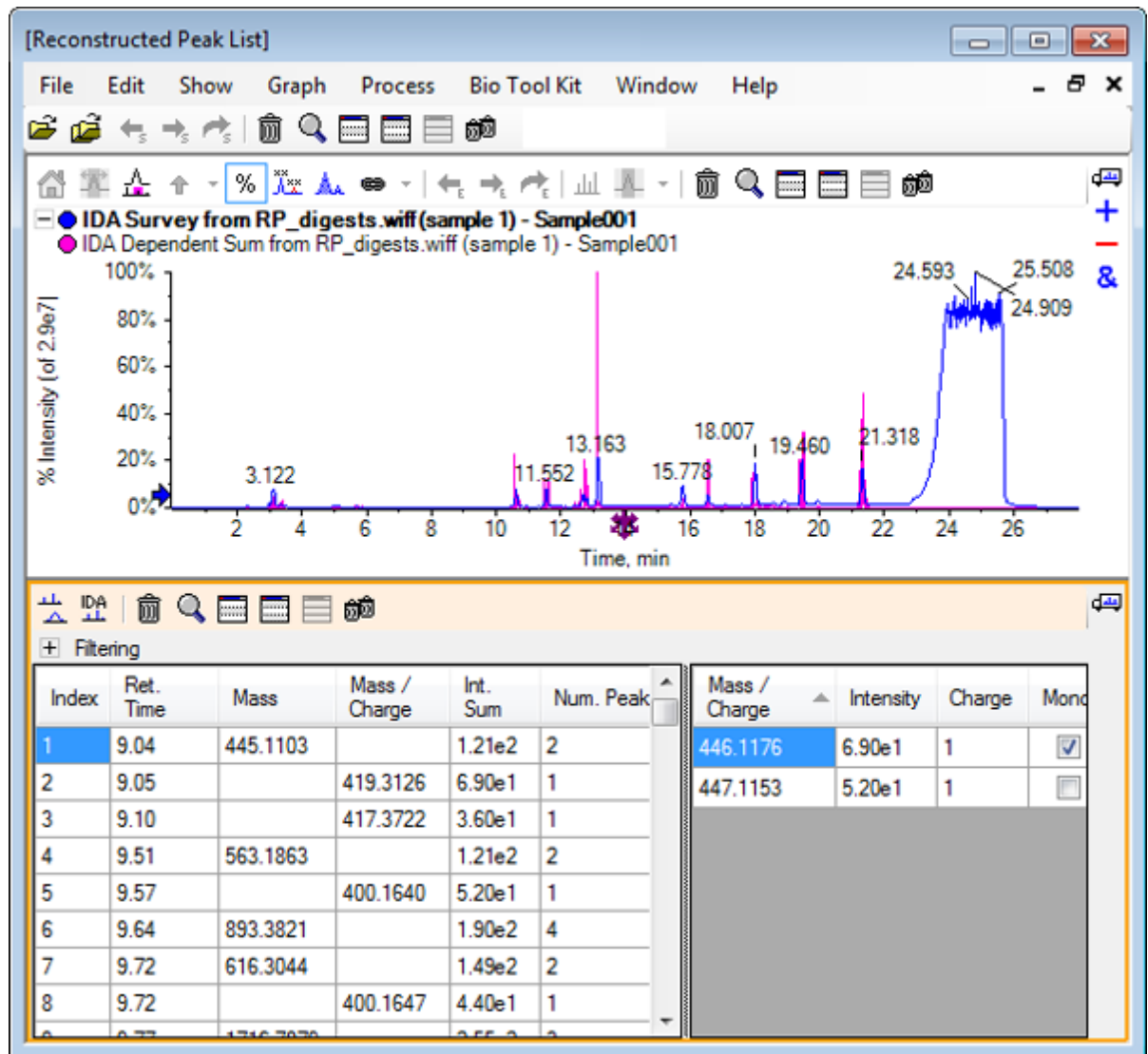
- **5** conteggi nel campo **Minimum intensity in counts**
- **1.5** nel campo **Chemical noise intensity multiplier**
- **0.100** Da nel campo **Mass tolerance**
- **5** nel campo **Maximum charge**

Nota: La tolleranza di massa nella sezione carica deconvoluzione fa in modo che il picco ricostruito sia abbinato con la proteina teoricamente digerita e che i diversi valori m/z appartenenti allo stesso peptide siano raggruppati insieme.

7. Fare clic su **OK**.

Il software mostra una tabella di peptidi separati dal tempo di ritenzione. Le seguenti informazioni vengono fornite per ogni peptide elencato: **Index, Ret. Time, Mass, Mass / Charge, Int. Sum** e **Num. Peaks**.

Figura D-95: Reconstructed Peak List



8. Espandere **Filtering** per mostrare le opzioni di filtro disponibili.

Le opzioni di filtro disponibili includono: **Intensity threshold**, **Min. Num. Peaks** e **Show matched peaks only**.

Figura D-96: Opzioni di filtraggio

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. Selezionare uno o più filtri per regolare la visualizzazione, come richiesto.

Nota: In questo tutorial, la soglia di intensità è stata impostata su 2.39e4 e il Min. Num. Peaks è stato impostato su 4.

Figura D-97: Elenco picchi filtrato ricostruito



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"/>

Barra degli strumenti

Utilizzare le icone nella barra degli strumenti per regolare la visualizzazione come richiesto.

Tabella D-6: Icone della barra degli strumenti

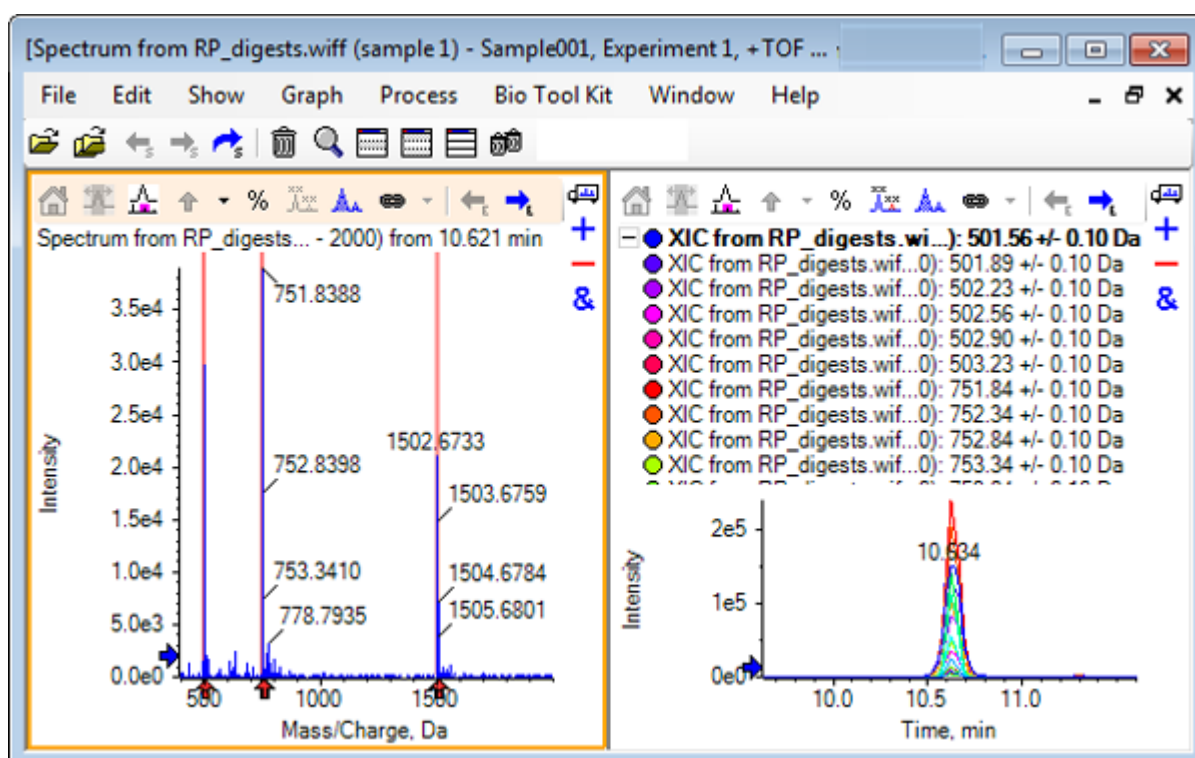
Icona	Nome (Suggerimento)
	Mostrare spettro e XIC
	Visualizzare gli spettri IDA MS/MS

Nota: Le ultime sei icone in questa barra degli strumenti, a cominciare dall'icona Elimina questo riquadro, sono descritte in [Barra degli strumenti del riquadro generico](#).

Mostrare spettro e XIC

Quando l'icona **Mostrare spettro e XIC** è selezionata, verrà aperto il seguente spettro e i riquadri XIC:

Figura D-98: Risultati di Mostrare spettro e XIC



Per lo spettro MS generato, una freccia è mostrata sotto ogni picco che ha contribuito alla massa del peptide. Il XIC di ogni picco m/z che ha contribuito alla massa del peptide viene visualizzato come sovrapposizioni nel riquadro a destra.

Visualizzare gli spettri IDA MS/MS

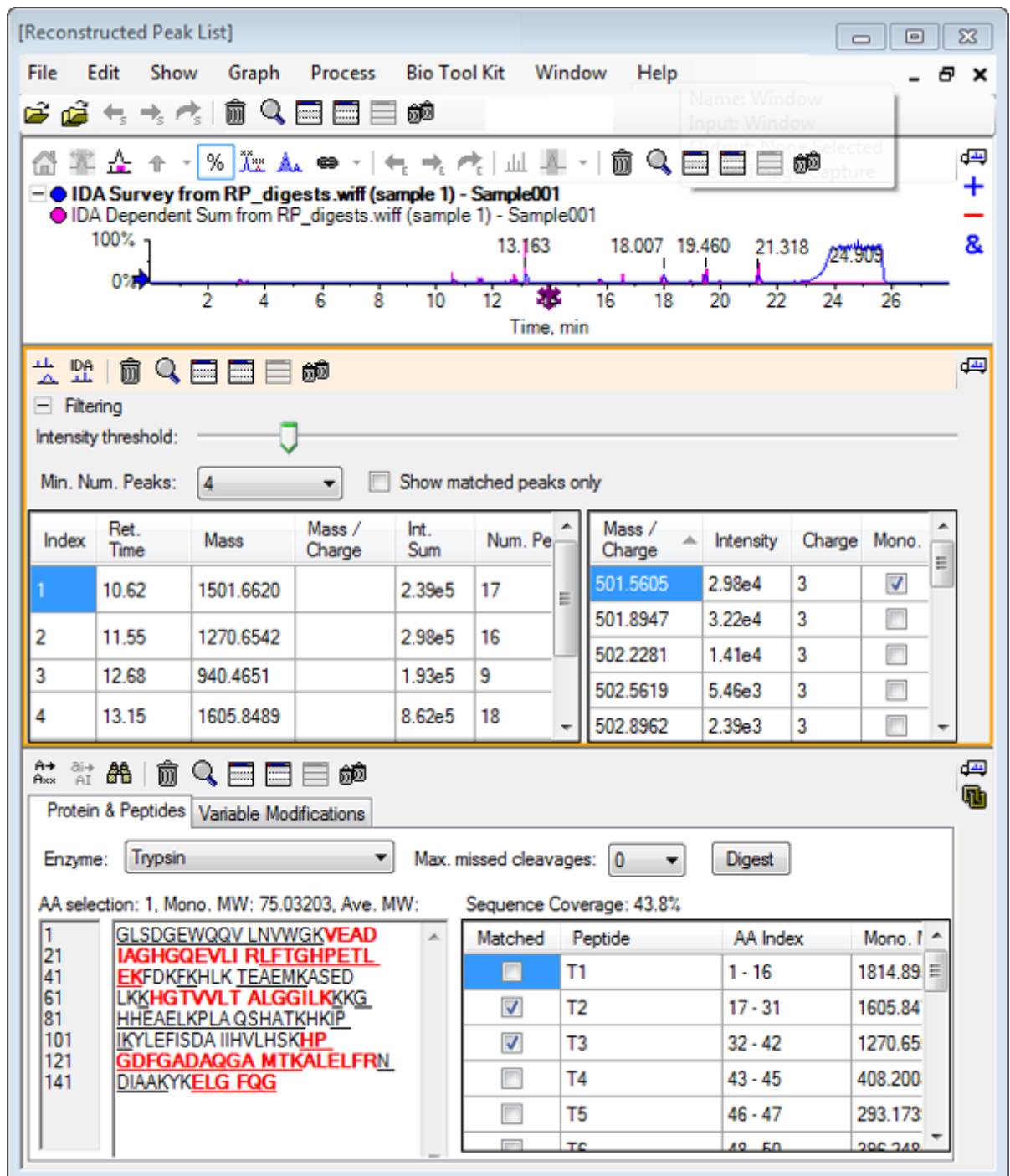
Quando l'icona **Visualizzare gli spettri IDA MS/MS** è selezionata, verrà aperto il seguente riquadro spettro:

Ricostruzione peptide LCMS con proteina digerita

1. Fare clic su **Bio Tool Kit > Digest Protein**.
Si apre il riquadro **Protein**.
2. Trascinare l'icona **Trascinare su un riquadro di proteine per impostare il proprio elenco di picchi** nel riquadro **Protein** nel riquadro **Reconstructed Peak List**.

Il riquadro **Protein** si aggiorna, mostrando le sequenze di peptidi nel riquadro **Protein** corrispondenti a quelle nel **Reconstructed Peak List**. I frammenti nel riquadro **Protein** mostrati in carattere rosso grassetto sono i frammenti con corrispondenze esatte nel riquadro **Reconstructed Peak List**. I frammenti mostrati in normale carattere rosso sono frammenti che avrebbero corrisposto ai frammenti nel riquadro **Reconstructed Peak List** se fosse stato loro assegnato lo stato di carica indicato fra parentesi nella colonna **Match** del riquadro **Reconstructed Peak List**. I frammenti mostrati in carattere nero sono frammenti che non corrispondono ad alcun frammento nel riquadro **Reconstructed Peak List**.

Figura D-99: Informazioni teoriche sul riquadro Protein collegato al Reconstructed Peak List



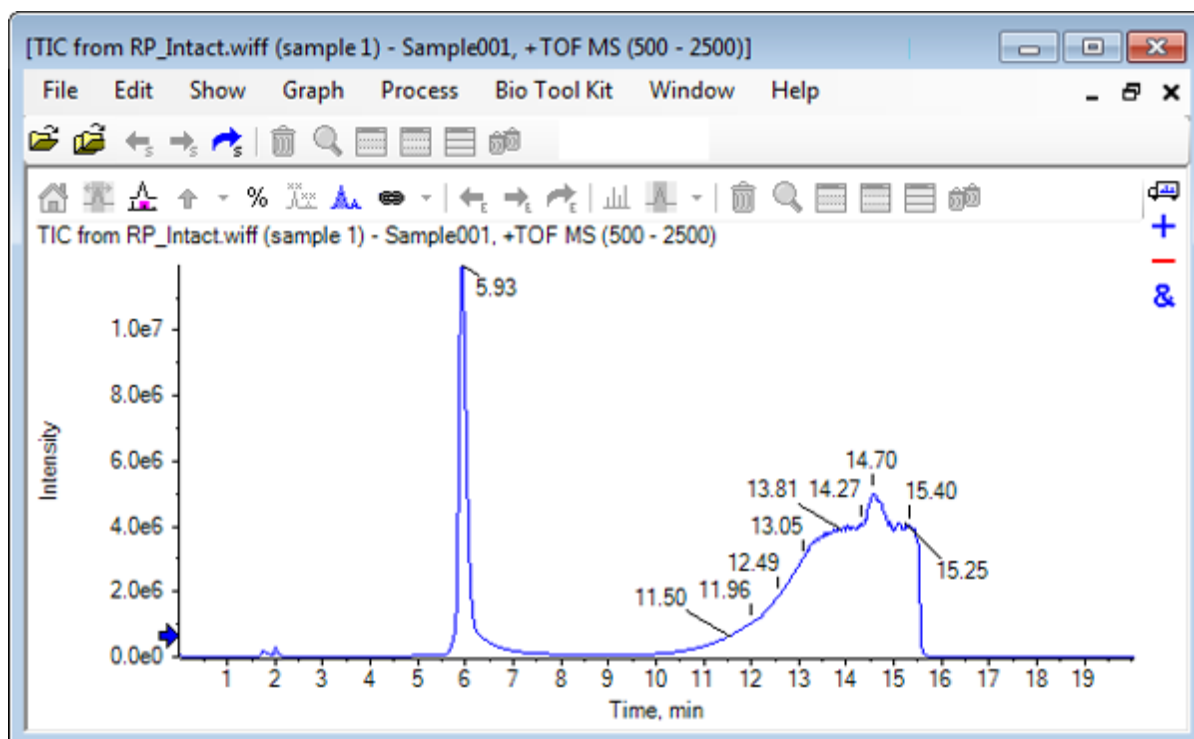
Ricostruire la proteina

Utilizzare questa opzione per ottenere la massa media (peso molecolare) di una proteina intatta.

Esercitazione per Explorer

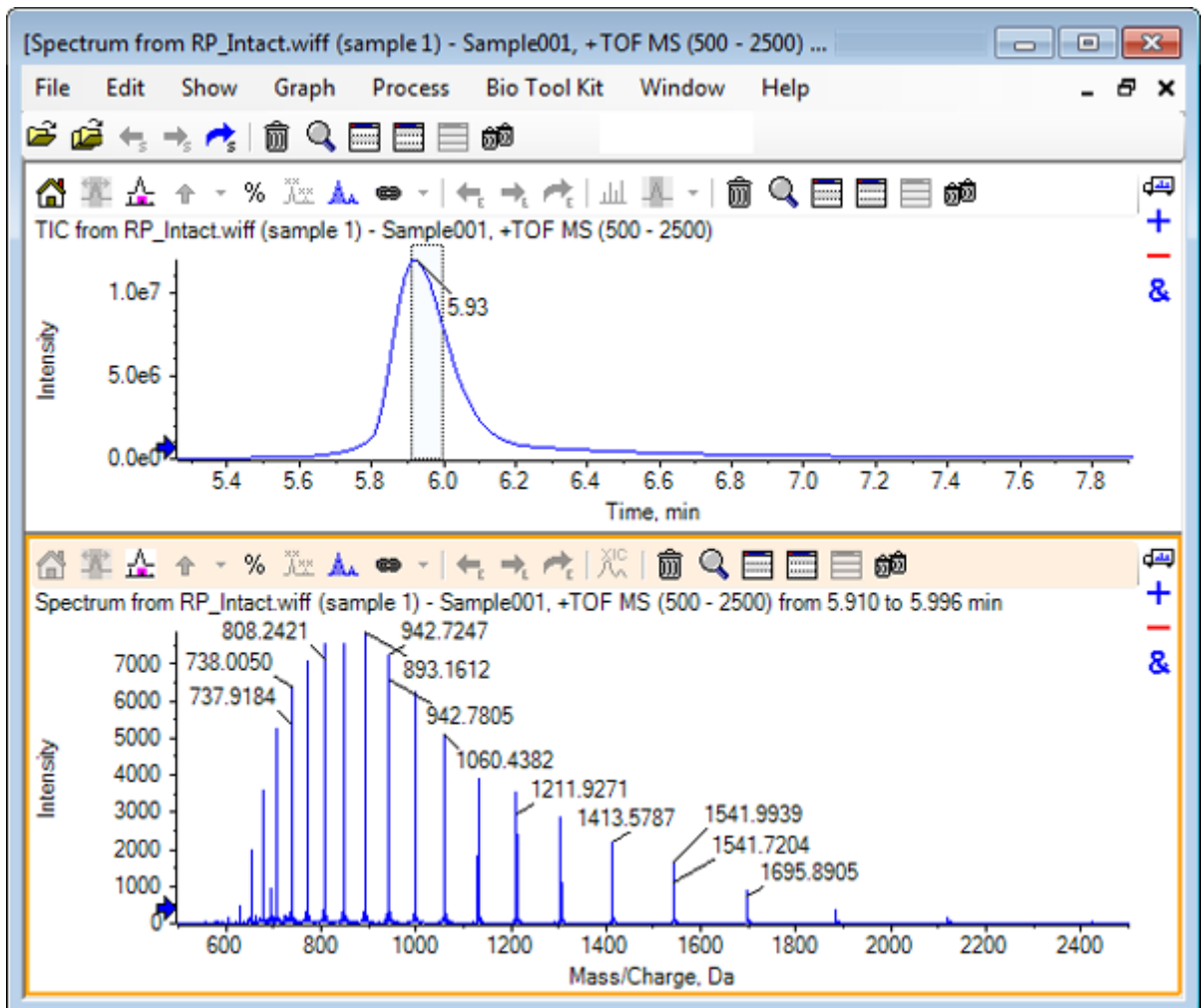
1. Fare clic sull'icona **Apri campione** nella barra degli strumenti principale. Si aprirà la finestra di dialogo **Select Sample**.
2. Se la cartella **Sample Data** non è già selezionata, fare clic su **Browse** e spostarsi sulla cartella **Sample Data**.
3. Selezionare il file **RP_Intact.wiff** e fare clic su **OK**.

Figura D-100: TIC dal file RP_Intact.wiff



4. Creare uno spettro mediato utilizzando una regione del picco a 5.93 min. Fare riferimento alla [Figura D-101](#).

Figura D-101: Spettro medio



5. Col riquadro dello spettro attivo, fare clic su **Bio Tool Kit > Reconstruct Protein**. Si apre la finestra di dialogo **Reconstruction Options**.

Figura 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: ▼

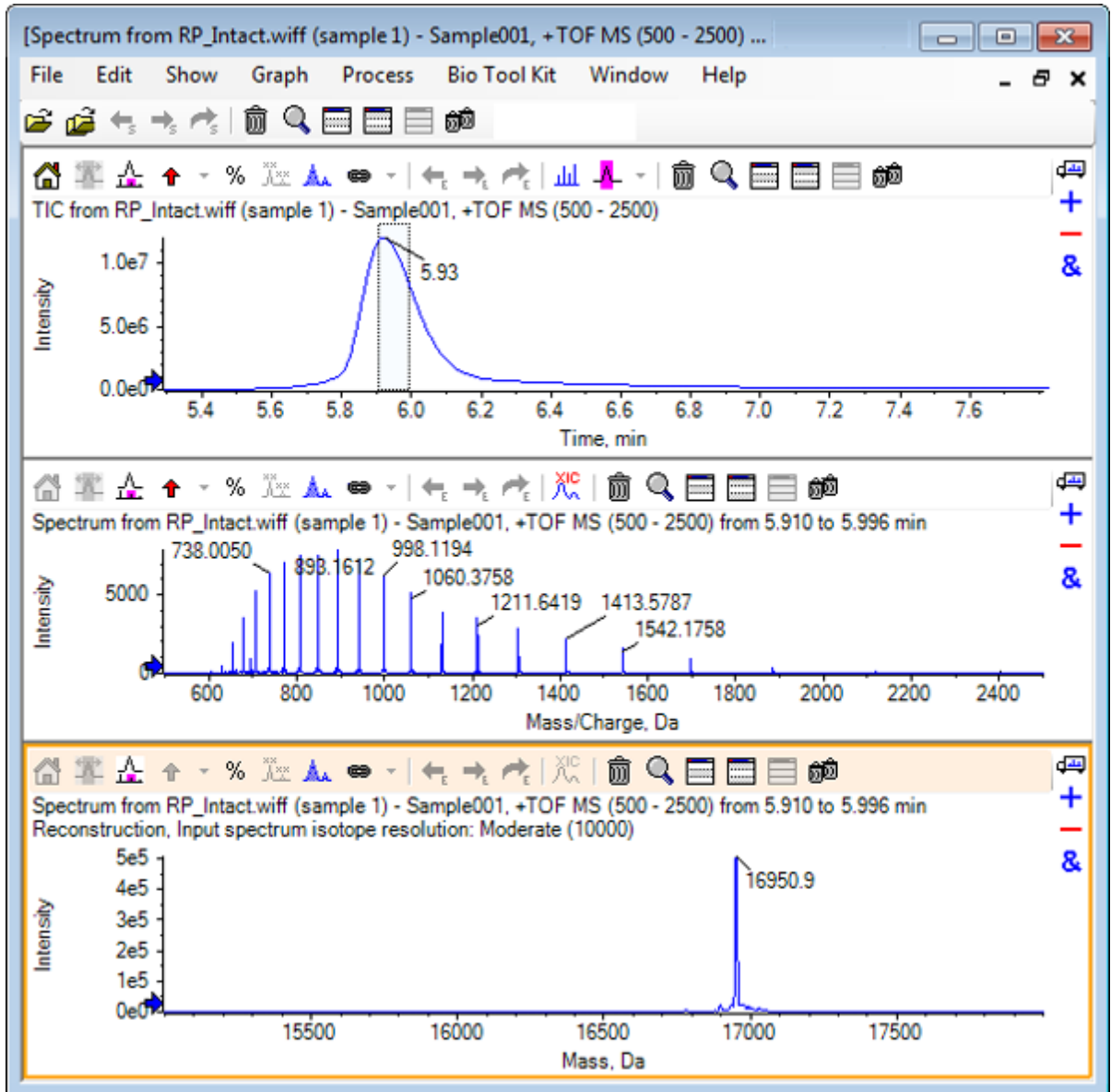
OK Cancel

6. Digitare i valori appropriati per le seguenti opzioni:
 - **Start mass:** 15000 Da
 - **Stop mass:** 18000 Da
 - **Step mass:** 1.0 Da
7. Selezionare il valore appropriato di **Input spectrum isotope resolution:** Moderate (10000).

Nota: Per i dati acquisiti utilizzando un sistema a quadrupolo, è mostrato il parametro Peak width invece del parametro Input spectrum isotope resolution.

8. Selezionare il valore appropriato di **Charge agent:** H+.
9. Fare clic su **OK**.
Il software genera uno spettro della proteina ricostruita in un riquadro separato col titolo: **Reconstruction, Input spectrum isotope resolution [user selection]**.

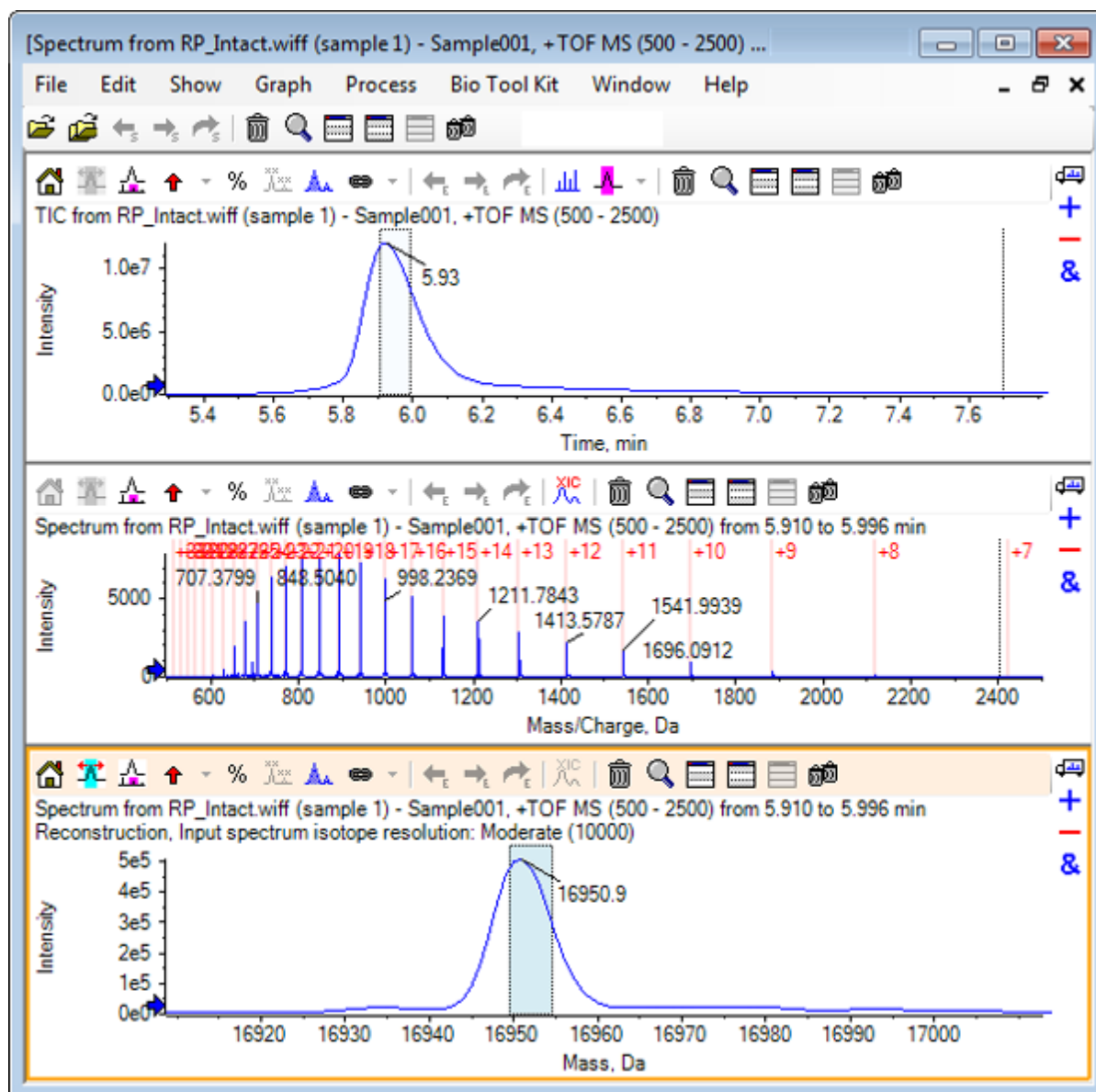
Figura D-103: Riquadro Ricostruzione



Nota: Per dati acquisiti utilizzando un sistema a quadrupolo, il titolo nel riquadro è: Reconstruction, Peak width [value].

- Selezionare il picco della proteina ricostruita.
I punti chiave di ricostruzione manuale verticale sono aggiunti allo spettro selezionato per generare la proteina ricostruita.

Figura D-104: Spettro con punti chiave di ricostruzione manuale



Riepilogo

In questa sezione sono state trattate le seguenti attività:

- Ordinare manualmente i dati spettrali MS/MS da un campione di proteine digerito.
- Collegare uno spettro ordinato manualmente con frammenti peptidici.
- Aggiungere marcatori (punti chiave ricostruiti manualmente) che indicano le posizioni del rapporto teorico m/z di una data massa in uno spettro.
- Rimuovere i marcatori da uno spettro.
- Ottenere informazioni sulle sequenze peptidiche teoriche derivanti dalla scissione enzimatica definita dall'utente di una specifica proteina.

- Utilizzare la ricostruzione peptide LCMS per identificare i picchi spettrali ed eseguire la deconvoluzione dei picchi spettrali identificati.
- Collegare le informazioni teoriche su un riquadro di proteine con una lista dei picchi ricostruiti.
- Ottenere la massa media (peso molecolare) di una proteina intatta.

Contatti

Formazione dei clienti

- In Nord America: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Al di fuori dell'Unione Europea e del Nord America, visitare sciex.com/education per trovare le informazioni di contatto.

Centro di istruzione online

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Assistenza SCIEX

SCIEX e i suoi rappresentanti si affidano a uno staff di tecnici di manutenzione e assistenza formati e qualificati, presenti in tutto il mondo. Saranno felici di rispondere a domande sul sistema o su eventuali problemi tecnici che potrebbero sorgere. Per ulteriori informazioni, visitare il sito web SCIEX all'indirizzo sciex.com oppure è possibile contattarci in uno dei seguenti modi:

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Sicurezza informatica

Per le ultime indicazioni sulla sicurezza informatica per i prodotti SCIEX, visitare il sito sciex.com/productsecurity.

Documentazione

Questa versione sostituisce tutte le versioni precedenti del documento.

Per visualizzare il documento in formato elettronico, è necessario che sia installato Adobe Acrobat Reader. Per scaricare la versione più recente, visitare il sito Web <https://get.adobe.com/reader>.

Per reperire la documentazione del software del prodotto, fare riferimento alle note di rilascio o alla guida all'installazione del software fornita con il software.

Per reperire la documentazione dell'hardware del prodotto, fare riferimento al DVD della documentazione del sistema o del componente.

Le versioni più recenti della documentazione sono disponibili sul sito Web SCIEX, all'indirizzo sciex.com/customer-documents.

Nota: per richiedere una versione stampata gratuita del presente documento, contattare sciex.com/contact-us.
