
Software Analyst MD

Guida avanzata per l'utente



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.

IVD

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.

CE

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.

UK
CA

Per uso diagnostico *in vitro*. Prodotti non disponibili in tutti i paesi. Per ulteriori informazioni, contattare il rappresentante di vendita di zona o visitare [sciex.com/diagnostics](https://www.sciex.com/diagnostics).

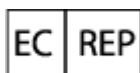
Rx only.

I prodotti potrebbero non essere disponibili in tutti i Paesi. Per ulteriori informazioni, contattare il rappresentante di vendita locale o fare riferimento al sito [Web sciex.com](https://www.sciex.com).

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](https://www.sciex.com/trademarks)).

AB Sciex™ è utilizzato su licenza.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH
Ernst-Leitz-Strasse 17-37
35578 Wetzlar
Germany



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Sommario

Capitolo 1: Informazioni generali	8
Analyst MD Eventi del software	8
Filtrare il registro di sistema in base alle informazioni correlate al software Analyst MD	8
Finestra del software Analyst MD	9
Modalità del software Analyst MD	10
AnalystService	11
Avvio di AnalystService	11
Arresto di AnalystService	12
Cartelle del progetto API Instrument	12
File di programma	12
Progetti e sottoprogetti	13
Sottoprogetti	13
Organizzazione dei progetti	14
Accesso e sicurezza	15
Aree di lavoro	16
 Capitolo 2: Modalità tuning e calibrazione	 19
Tuning	20
Calibrazione	20
Sintonizzazione e calibrazione automatica	20
(Opzionale) Backup manuale dei parametri strumento	21
(Opzionale) Ripristino dei parametri strumento	21
Ottimizzazione composto	21
Analisi mediante iniezione in flusso	22
Infusione	22
T-Infusion	22
 Capitolo 3: Metodi di acquisizione	 23
Dispositivi nei metodi di acquisizione	23
Aggiunta o rimozione di un dispositivo periferico	23
Impostazione delle proprietà della pompa LC	24
Impostazione delle proprietà dell'autocampionatore	24
Impostazione delle proprietà della pompa a siringa integrata	25
Impostazione delle proprietà del forno a colonna	25
Impostazione delle proprietà della valvola di commutazione	25
Impostazione dei parametri del Diode Array Detector (Agilent)	26
Impostazione delle proprietà del convertitore analogico-digitale	26
Tempo di riempimento dinamico	27
Esperimenti e periodi	27
Esperimenti	27
Periodi	28

Metodi di acquisizione dipendente da informazione	28
Scheduled Ionization	29
Valori di comprimibilità solvente	31
Dimensione siringa rispetto alla portata	32
Capitolo 4: Lotti	34
Batch Editor	34
Importazione di file di lotto	35
Impostazione dei dettagli di quantificazione in Batch Editor (opzionale)	36
Capitolo 5: Analisi qualitativa dei dati	37
Cromatogrammi	37
Spettri	37
Sottrazione di fondo	38
Esecuzione di una sottrazione del fondo per un cromatogramma	38
Sblocco degli intervalli	40
Sottrazione di base	40
Calcolatori	40
Calcolatore Elemental Composition	41
Calcolatore HyperMass	41
Calcolatore Elemental Targeting	41
Calcolatore Mass Property	41
Calcolatore Isotopic Distribution	41
Accesso ai calcolatori	42
Picchi centroidi	42
Calcolo del centroide di un picco	43
Analisi dei dati	43
Cromatogramma ionico totale	43
Cromatogramma a ioni estratti	44
Cromatogramma picco di base	44
Cromatogramma a lunghezze d'onda estratte	44
Diode Array Detector	44
Cromatogramma lunghezza d'onda totale	44
Sovrapposizione dei grafici	45
Commutazione tra i grafici sovrapposti	45
Sum Overlays	45
Personalizzazione dei grafici	46
Aggiunta di didascalie a un grafico	46
Aggiunta di testo in un grafico	46
Compound Database	47
Contour Plot	47
Visualizzazione di un Contour Plot	48
Selezione di un'area in un Contour Plot	49
Impostazione dell'intensità e dell'assorbanza in un Contour Plot	49
Modifica dei colori in un Contour Plot	49
Algoritmo Dynamic Background Subtraction	50
Fragment Interpretation	50
Connessione dello strumento Fragment Interpretation a uno spettro	50

Sommario

Abbinamento dei frammenti ai picchi	51
Selezione di un legame in una struttura molecolare	51
Visualizzazione degli isotopi	51
Visualizzazione di una differenza di formula in uno spettro	52
Visualizzare una differenza di formula nell'elenco frammenti	52
Visualizzazione di una differenza di formula in una struttura molecolare	52
IDA Explorer	52
Library Database	54
Passaggio tra database di librerie esistenti	55
Creazione di un Local Library Database	56
Collegamento ad un Library Database su server	57
Visualizzazione di tutti i record libreria	59
Aggiunta di un record alla libreria	59
Ricerca dei record libreria con vincoli	60
Suggerimenti per ricerche nella libreria	61
Ricerca di uno spettro simile	61
Visualizzare un composto dai risultati delle ricerca	63
File di dati elaborati	63
Salvataggio di un file di dati elaborati	63
Apertura di un file di dati elaborati	63
Dati qualitativi	64
Rapporto segnale-rumore	64
Algoritmi di smussamento	64
Smoothing dei dati con l'algoritmo di smoothing	65
Smussamento dei dati con l'algoritmo di smussamento gaussiano	66
Log di sistema	66
Salvataggio del log di sistema e inoltro al supporto	67
Filtrare il registro di sistema in base alle informazioni correlate al software	
Analyst MD	67
Capitolo 6: Analisi quantitativa dei dati	68
Opzioni di calibrazione	68
Informazioni sulle curve di calibrazione	68
Selezione del tipo di regressione migliore	68
Selezione del fattore di pesatura migliore	69
Algoritmi di integrazione	70
Algoritmi di integrazione Analyst Classic e IntelliQuan Integration	70
Strumenti di creazione del metodo di quantificazione	72
Procedure guidate	72
Quantitation Method Editor	74
Quantitation Method Editor semiautomatico	74
Metric plot	75
Generazione di un Metric Temporary Plot	76
Generazione di un metric plot e salvataggio dei criteri di plotting	76
Salvataggio dei criteri di plotting di default per future Tabelle dei risultati	78
Parametri Noise e Area Threshold	78
Ricalcolo della soglia di area e di rumore	79
Integrazione picco	79
Peak Review	80

Suggerimenti per la revisione dei picchi.....	80
Rilevamento dei picchi	80
Rilevamento avvio potenziale picco	81
Conferma dell'avvio del picco.....	81
Rilevamento della sommità del picco.....	83
Rilevamento della fine del picco	85
Picchi separati.....	87
Query	88
Query sul tipo di campione	88
Query predefinite e query specifiche per tabella	88
Come le variazioni di precisione alterano i risultati	89
Equazioni di regressione	89
Opzioni di adattamento	90
Fattori di ponderazione	92
Modelli di rapporti.....	92
Personalizzazione dei rapporti.....	95
Anteprima, stampa ed esportazione di report.....	95
Results Table	96
Visualizzazione di un layout specifico per Results Table	97
Ordinamento dei dati nelle Results Table	97
Ordinamento di una Tabella dei risultati e salvataggio dei criteri di ordinamento	97
Salvataggio dei criteri di ordinamento di default per le future Results Table	98
Ordinamento di una Results Table in base a criteri di ordinamento preimpostati	100
Informazioni sull'uso delle query con le Results Table	100
Confronto dei risultati tra i lotti	100
Come i livelli di concentrazione influenzano i risultati	101
Layout delle Results Table	101
Campi della Results Table	104
Suggerimenti per la Results Table	111
Appendice A: Icone della barra degli strumenti.....	112
Appendice B: PPG Exact Mass Table	113
Contatti.....	119
Formazione dei clienti	119
Centro di istruzione online	119
Assistenza SCIEX	119
Sicurezza informatica	119
Documentazione	119

La *Advanced User Guide* fornisce informazioni sulle funzionalità del software Analyst MD.

Analyst MD Eventi del software

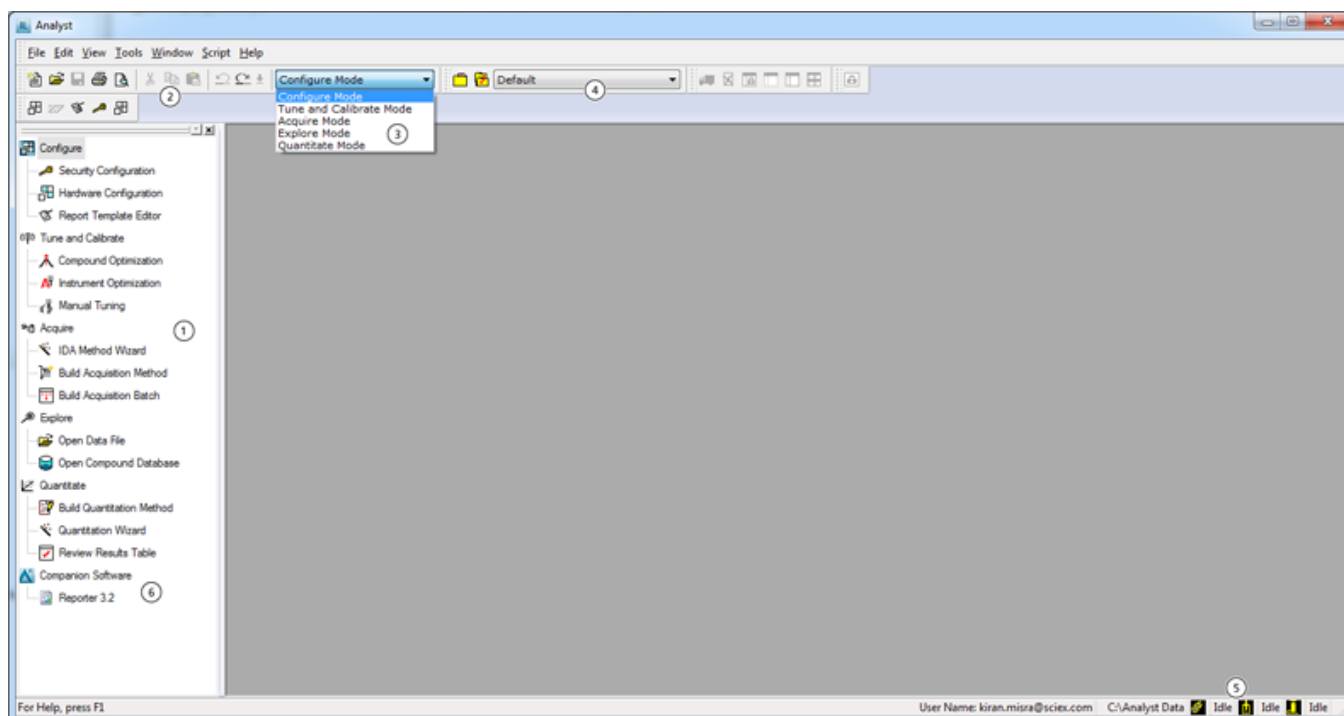
Il registro di sistema contiene i rapporti degli eventi di sistema che includono errori, avvertenze e messaggi. Utilizzare Windows Event Viewer per visualizzare informazioni che potrebbero essere utili per la risoluzione dei problemi e l'esecuzione della diagnostica del sistema. Per utilizzare in maniera efficace le informazioni del registro di sistema, filtrare le informazioni per visualizzare solo gli elementi relativi al software.

Filtrare il registro di sistema in base alle informazioni correlate al software Analyst MD

1. Fare clic su **View > Event Log**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Event Viewer.
2. Fare doppio clic sulla cartella **Windows Logs**.
3. Fare clic su **Application**.
4. Fare clic su **Action > Filter Current Log**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Filter Current Log.
5. Selezionare **Analyst** nel campo **Event Sources**.
6. Fare clic su **OK**.
Nella finestra di dialogo Event Viewer vengono mostrati solo gli eventi del software Analyst MD filtrati.

Finestra del software Analyst MD

Figura 1-1: Finestra del software Analyst MD



Elemento	Descrizione
1	<p>Barra di navigazione: la barra di navigazione consente di accedere alle varie modalità software. Gli utenti possono personalizzare alcuni elementi della barra di navigazione in base alle loro preferenze. Ad esempio, gli utenti possono ridimensionarla, spostarla o fissarla in posizione. Per nascondere la barra di navigazione, fare clic sulla × nell'angolo superiore destro. Per visualizzare la barra di navigazione, fare clic su View > Navigation Bar.</p> <p>Il livello superiore della struttura di navigazione ha un'icona che rappresenta ciascuna modalità software. Fare doppio clic sull'icona per una determinata modalità per espandere o ridurre la struttura. In questo modo si mostrano o si nascondono le icone per la funzionalità disponibile all'interno della modalità selezionata.</p>
2	<p>Barra del menu: cambia in base alla modalità. Alcune opzioni, come Cut, Copy e Paste, sono le stesse in tutte le modalità. Altre opzioni sono specifiche di determinate modalità e non sono disponibili in altre modalità.</p>
3	<p>Elenco delle modalità: fare clic per cambiare modalità. Modalità diverse hanno icone diverse nella barra degli strumenti.</p>

Elemento	Descrizione
4	Elenco progetti: fare clic per cambiare il progetto in cui vengono salvati i dati.
5	Stato dello strumento e del dispositivo periferico: la barra di stato contiene le informazioni sulle attività attuali. Indica lo Stato dello strumento con un colore: verde (pronto), giallo (inattivo), rosso (errore) o bianco (nessuna stazione di lavoro per lo strumento locale). Un'icona indica lo stato di uno strumento remoto. Fare doppio clic sull'icona per aprire la finestra di stato del dispositivo.
6	Software correlato: contiene qualsiasi software correlato installato aperto dal software.

Modalità del software Analyst MD

Il software è diviso in due modalità, che sono aree funzionali distinte dove gli utenti possono eseguire una gamma di attività relative ad un'operazione principale. Gli utenti possono accedere alle modalità attraverso la barra di navigazione o l'elenco Mode nella barra degli strumenti, e possono passare da una modalità all'altra senza perdere alcun lavoro.

Tabella 1-1: Modalità del software Analyst MD

Nome	Descrizione
Configure	(Configura)Utilizzare questa modalità per configurare dispositivi e impostazioni di sistema. Impostare vari tipi di opzioni e parametri per il software, inclusi la configurazione hardware e le impostazioni del modello di report.
Tune and Calibrate	(Esegui tuning e calibrazione)Utilizzare questa modalità per impostare opzioni per eseguire il tuning degli strumenti per garantire risultati ottimali. In questa modalità, gli utenti possono: <ul style="list-style-type: none">• Eseguire l'ottimizzazione dello strumento.• Eseguire il tuning manuale.• Modificare l'aspetto di visualizzazioni grafiche, selezionare i tipi di informazioni mostrate quando vengono aperte le informazioni sul file e impostare le opzioni di collegamento e altre opzioni correlate all'aspetto.• Modificare opzioni di elaborazione.

Tabella 1-1: Modalità del software Analyst MD (continua)

Nome	Descrizione
Acquire	(Acquisisci) Utilizzare questa modalità per impostare opzioni per decidere come acquisire i campioni. In questa modalità, gli utenti possono: <ul style="list-style-type: none">• Creare un metodo di acquisizione IDA con IDA Method Wizard.• Creare un metodo di acquisizione con Acquisition Method Editor.• Creare un lotto con Batch Editor.• Visualizzare la lista dei campioni in queue con il Queue Manager.• Monitorare lo stato di acquisizione.
Explore	(Esplora) Utilizzare questa modalità per eseguire l'analisi qualitativa sui campioni. In questa modalità, gli utenti possono: <ul style="list-style-type: none">• Visualizzare un grafico.• Visualizzare un cromatogramma.• Visualizzare uno spettro.• Guardare i dati in tempo reale durante l'acquisizione di un lotto.
Quantitate	(Quantifica) Utilizzare questo metodo per analizzare i dati acquisiti e creare un metodo quantitativo per generare una Results Table. Usare la Results Table per analizzare manualmente tutti i picchi per ciascun analita e standard interno in un lotto, nonché per visualizzare le curve di calibrazione, le statistiche dei campioni e i metric plot.

AnalystService

AnalystService è il percorso di comunicazione tra lo spettrometro di massa e i dispositivi collegati. AnalystService si avvia ogni volta che si avvia il software Analyst MD. AnalystService si avvia automaticamente quando l'utente accede a Windows. Se il servizio non è in esecuzione quando si avvia il software Analyst MD, AnalystService si avvia automaticamente.

Avvio di AnalystService

Se Startup Type per AnalystService è impostato su **Manual**, avviare manualmente AnalystService prima di avviare il software Analyst MD. Non modificare **Startup Type**.

1. Aprire Administrative Tools.
2. Fare doppio clic su **Services**, quindi su **AnalystService**.
3. Fare clic su **Start**.

Arresto di AnalystService

Arrestare AnalystService se ci sono problemi di comunicazione con lo strumento o se ci sono problemi di comunicazione tra lo strumento e i dispositivi periferici.

1. Aprire Administrative Tools.
2. Fare doppio clic su **Services**, quindi su **AnalystService**.
3. Fare clic su **Stop**.

Cartelle del progetto API Instrument

Di seguito sono riportate alcune cartelle che si trovano nel progetto API Instrument:

- **Bundler**: contiene un programma che prende tutti gli aspetti di un file di dati (file wiff) e li combina automaticamente quando il campione è stato completato.
- **Configuration**: contiene tutti i profili hardware (file hwpf).
- **Instrument Data**: contiene un file denominato `InstrumentData.ins`. Il file conserva tutte le informazioni fondamentali per la calibrazione e di altro tipo.
- **Method Tables**: contiene tutti i parametri strumento che definiscono le funzioni di scansione migliorate. Non cambiare i file di questa cartella. La modifica del contenuto di questa cartella altera le prestazioni delle modalità di scansione migliorate.
- **Parameter Settings**: contiene tutti i parametri strumento e i collegamenti. I parametri strumento vengono salvati come file `ParamSettingsdef.psf`.
- **Preferences**: contiene il file `Tunedata.tun`. Tutte le impostazioni, tra cui parametro, tuning, strumento, elaborazione, aspetti e coda, vengono salvate come `Tunedata.tun` in questa cartella.
- **Processing Scripts**: contiene gli script per l'elaborazione dei dati in modalità Explore. Gli script sono contenuti nel menu **Script**.
- **Queue Data**: contiene le informazioni derivate dalla coda.
- **Tuning Cache**: contiene tutti i dati creati in Manual Tuning facendo clic su **Start** e non su **Acquire**. I file vengono salvati con un'ora e una data generiche per i relativi nomi. La cartella Tuning Cache contiene un numero di file limitato e sovrascriverà i file come necessario. Salvare i file con un nuovo nome e spostarli subito se è necessario salvarli.

File di programma

Le seguenti cartelle sono contenute nella cartella `Program Files\Analyst` sul sistema operativo a 32 bit Windows 7 o nella cartella `Program Files (x86)\Analyst` del sistema operativo a 64 bit Windows 7 o Windows 10.

- **bin**: contiene i file di programma del software Analyst MD. Il contenuto di questa cartella non deve essere modificato, poiché potrebbe influire sul funzionamento del software.
- **binEx2**: contiene i componenti necessari per controllare i dispositivi ExionLC 2.0.

- **binEx:** contiene i componenti necessari per controllare i dispositivi ExionLC, Jasper, Shimadzu LC20/30 controllati utilizzando i dispositivi Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller e Shimadzu LC40.
- **Firmware:** Contiene i file della tabella di configurazione del firmware del sistema dello strumento e i file del firmware dello strumento. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla *Guida all'installazione del software* inclusa con il software.
- **Help:** contiene i file della Guida, le guide, i tutorial, le *Note di rilascio* e la *Guida all'installazione del software*.
- **Scripts:** contiene gli script che l'utente può installare se necessario. Questi script non sono installati automaticamente se il software Analyst MD è installato. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla *Guida sugli script per l'utente*.
- **Simulation:** contiene i file di dati dello strumento necessari per eseguire il software nella modalità di simulazione.

Progetti e sottoprogetti

Prima di avviare un esperimento, decidere dove memorizzare i file correlati all'esperimento stesso. Utilizzare progetti e sottoprogetti per ogni esperimento, allo scopo di gestire meglio i dati e confrontare i risultati. Ad esempio, è possibile utilizzare i sottoprogetti per archiviare i risultati riferiti a date specifiche.

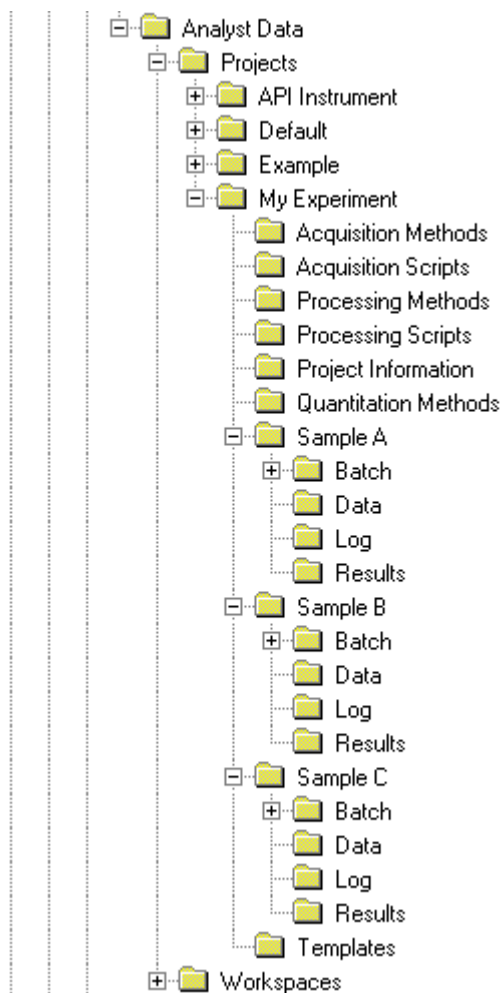
Nota: Per usare una struttura a sottoprogetti all'interno di un progetto, definire almeno un sottoprogetto nel momento in cui si crea il progetto per la prima volta. Gli utenti non possono creare un sottoprogetto in un progetto esistente che non abbia già una struttura di sottoprogetti.

Sottoprogetti

Un sottoprogetto contiene un sottogruppo di cartelle del progetto. Tutti i sottoprogetti devono contenere le stesse cartelle. I sottoprogetti sono utili per organizzare i dati.

Ad esempio, se si stanno elaborando campioni di vari composti provenienti da diversi laboratori con lo stesso metodo di acquisizione, è possibile creare sottoprogetti per archiviare i risultati di ciascun laboratorio, ma lasciando la cartella del metodo di acquisizione nel progetto. Il metodo di acquisizione sarà così disponibile per l'utilizzo con il sottoprogetto o il laboratorio. In alternativa, se si elaborano campioni nell'arco di varie settimane, è possibile archiviare i risultati di ogni giorno in un sottoprogetto separato. Fare riferimento alla figura seguente.

Figura 1-2: Esempio di struttura di una cartella di progetti e sottoprogetti



Organizzazione dei progetti

Un progetto è una struttura di cartelle che consente di organizzare e archiviare informazioni su campioni, dati, informazioni di quantificazione, ecc. All'interno di ogni progetto ci sono cartelle che possono contenere diversi tipi di file. Ad esempio, la cartella Data contiene i file dei dati di acquisizione. Per una descrizione del contenuto di cartelle diverse, fare riferimento alla seguente tabella.

Il software può accedere ad un progetto solo se è archiviato in una cartella radice. Gli utenti non possono creare progetti in una cartella che non sia stata definita come cartella radice.

La cartella radice preimpostata è Analyst Data, sul drive selezionato durante l'installazione del software. Per archiviare i progetti in altre posizioni, occorre creare nuove cartelle radice. Per ulteriori informazioni sulle cartelle radice, fare riferimento al documento: *Guida*.

Tabella 1-2: Cartelle del progetto

Cartella	Contenuto
\Acquisition Methods	Contiene tutti i metodi di acquisizione disponibili. I file del metodo di acquisizione hanno l'estensione dam.
\Acquisition Scripts	<p>Gli script di acquisizione non sono disponibili nel software Analyst MD. Questa cartella è vuota.</p> <p>Lo scripting del software Analyst MD, che consente la creazione di script personalizzati (sequenze operative analista personalizzate), non deve essere utilizzato come parte di un dispositivo diagnostico <i>in vitro</i>. I controlli software interni condotti quando si utilizza il software Analyst MD non eseguiti su script personalizzati possono generare risultati erroneamente collegati a un ID campione.</p>
\Batch	Contiene tutti i file di lotto di acquisizione disponibili. I file del lotto di acquisizione hanno l'estensione dab. Contiene inoltre una sottocartella, Templates, che a sua volta contiene modelli dei lotti di acquisizione. I file dei modelli dei lotti hanno l'estensione dat.
\Data	Contiene i file dei dati di acquisizione, che hanno l'estensione wiff.
\Log	Contiene i risultati della quantificazione e dell'ottimizzazione dei composti.
\Processing Methods	Contiene tutti i metodi di elaborazione dei dati qualitativi in uso.
\Processing Scripts	Contiene gli script di elaborazione dati. Gli script di elaborazione archiviati nel progetto API Instrument vengono mostrati nel menu Scripts .
\Project Information	Contiene tutte le informazioni e le impostazioni del progetto. Questa cartella non può essere salvata in un sottoprogetto.
\Quantitation Methods	Contiene tutti i metodi di quantificazione utilizzati, che hanno un'estensione qmf.
\Results	Contiene tutti i file della Results Table di quantificazione, che hanno estensione rdb.
\Templates	Contiene i file dei modelli di report, che hanno l'estensione rpt.

Accesso e sicurezza

Il software Analyst MD funziona con i componenti di auditing degli eventi di sicurezza, applicazione e sistema degli strumenti amministrativi di Windows.

Informazioni generali

Inoltre, il software ha numerose funzioni per la configurazione e la gestione della sicurezza. L'amministratore software può:

- Scegliere una modalità di sicurezza per soddisfare meglio le esigenze dell'ambiente operativo.
- Aggiungere ed eliminare utenti e ruoli.
- Impostare i diritti di accesso per gli utenti e i ruoli secondo necessità.
- Controllare l'accesso agli spettrometri di massa remoti.
- Controllare l'accesso ai file di progetto.

Per ulteriori informazioni sulla sicurezza software, fare riferimento al documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Nota: Eventuali modifiche alla configurazione della sicurezza software diventeranno effettive dopo il riavvio del software.

Aree di lavoro


L'area di lavoro è una disposizione particolare di finestre e riquadri, inclusi qualsiasi file associati. Ad esempio, mentre si sta lavorando su un particolare set di dati, l'utente può aprire e modificare le dimensioni di diverse finestre come aiuto nell'analisi. Questa disposizione, o area di lavoro, può essere salvata affinché, la volta successiva in cui l'utente osserverà i dati, la disposizione della finestra sarà identica.

L'utente può personalizzare l'area di lavoro selezionando quali finestre e riquadri deve contenere ciascuna area di lavoro. Gli utenti possono modificare le dimensioni e la posizione delle finestre e dei riquadri, bloccare pannelli e nascondere o mostrare alcuni riquadri e finestre. In questo modo, l'utente può personalizzare un'area di lavoro in base alle attività.

Nelle modalità Quantitate and Explore, gli utenti possono avere più aree di lavoro per sessione. L'utente può salvare un'area di lavoro, che include anche i dati associati. In una di queste due modalità, una particolare area di lavoro può essere aperta senza uscire da quella modalità. Per riutilizzare una particolare disposizione delle finestre e dei riquadri per altri set di dati, l'utente può salvare un'area di lavoro come modello. Nelle modalità Tune and Calibrate o Acquire, il software salva automaticamente l'area di lavoro.

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Creare un'area di lavoro	<ol style="list-style-type: none"> 1. Sulla barra di navigazione, fare clic sulla modalità in cui verrà creata l'area di lavoro. 2. Aprire le finestre e i riquadri da includere nell'area di lavoro, quindi disporli sullo schermo, bloccando insieme le finestre e ridimensionando le finestre e i riquadri secondo necessità. 3. Fare clic su File > Save Workspace. 4. Nel campo File name digitare un nome file per l'area di lavoro. <hr/> <p>Nota: Insieme, il nome dell'area di lavoro e il percorso non possono superare 255 caratteri. Il nome dell'area di lavoro è seguito da un punto e l'estensione wws per indicare che si tratta di un file della stazione di lavoro.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 5. Fare clic su Save. <p>Le informazioni sull'area di lavoro vengono salvate in un file con l'estensione wws nella directory specificata.</p>
Apertura di un'area di lavoro	<p>Nelle modalità Quantitate ed Explore, è possibile aprire diverse aree di lavoro senza uscire dalla modalità corrente.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Fare clic su File > Open Workspace. 2. Selezionare il file dell'area di lavoro appropriato dall'elenco, quindi fare clic su OK.
Salvataggio di un'area di lavoro	<ol style="list-style-type: none"> 1. Nella modalità Quantitate o Explore, assicurarsi che l'area di lavoro sia attiva. 2. Fare clic su File > Save Workspace As. <hr/> <p>Suggerimento! Fare clic su Save Workspace per salvare le informazioni sull'area di lavoro con il percorso e il nome del file corrente.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 3. Digitare un nome per il file dell'area di lavoro, quindi fare clic su Salva. <p>Il software salva automaticamente le informazioni su finestre e riquadri come parte dell'area di lavoro associata alla modalità corrente. Nella modalità Configure, Tune and Calibrate o Acquire, il software salva automaticamente l'area di lavoro quando l'utente chiude la modalità corrente.</p>

Informazioni generali

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Blocco del software	1. Sulla barra degli strumenti, fare clic su Lock Application  .

Le operazioni di tuning e calibrazione ottimizzano la risoluzione e le prestazioni di intensità dello spettrometro di massa.

Durante il tuning è possibile eseguire le seguenti attività:

- Regolare i valori di offset della risoluzione per regolare l'intensità e la risoluzione delle masse calibranti (solo per la modalità quadrupolo).
- Selezionare le masse da calibrare. Se necessario, le masse possono essere aggiunte e rimosse dall'elenco di calibrazione.
- Creare uno o più gruppi standard di calibrazione unici. Un gruppo standard di calibrazione deve avere almeno due composti per gli estremi inferiore e superiore del range di massa di interesse.

Uno strumento sottoposto a tuning e calibrato può rilevare la risoluzione del picco specificato e l'assegnazione della massa del campione. Questo è possibile utilizzando uno standard di calibrazione noto come PPG (glicole di polipropilene). Uno standard di calibrazione viene usato per calibrare la scala della massa per rilevare gli ioni target il più vicino possibile all'esatto rapporto massa-carica, entro uno spostamento di massa accettabile. Oltre a identificare il picco esatto, gli utenti possono regolare la risoluzione per ottenere la forma e la larghezza ottimali del picco.

Uno spettrometro di massa calibrato e sottoposto a tuning correttamente fornisce il risultato ottimale per qualsiasi campione o composto analizzato nello spettrometro di massa. Il tuning e la calibrazione vengono eseguiti insieme, indipendentemente dall'ottimizzazione. Il tuning e la calibrazione riguardano la risoluzione e la calibrazione di massa. L'ottimizzazione riguarda la sensibilità.

Le modifiche alla configurazione dello spettrometro di massa durante il tuning e la calibrazione vengono salvate in file di dati nella cartella API Instrument. È necessario utilizzare i parametri preimpostati nella cartella del metodo API Instrument perché sono stati ottimizzati dal Responsabile dell'Assistenza Tecnica (FSE) SCIEX.

Dopo il tuning e la calibrazione, le prestazioni di sistema vengono ottimizzate e i parametri specificati diventano i parametri predefiniti per tutti gli esperimenti. Gli utenti possono eseguire gli esperimenti con i parametri dipendenti dal composto e dalla sorgente ottimizzati per ottimizzare la risposta per qualsiasi analita.

Suggerimento! Pulire la regione del Q0 regolarmente per ridurre al minimo l'impatto della carica (una notevole perdita di sensibilità degli ioni di interesse in un breve periodo di tempo) sui quadrupoli. Fare riferimento al documento: *Qualified Maintenance Person Guide*.

Gli utenti possono sintonizzare e calibrare lo strumento automaticamente o manualmente.

Automatic tuning: il software esegue l'ottimizzazione della risoluzione e la calibrazione di massa, utilizzando l'Instrument Optimization Wizard. Per gli strumenti con trappola lineare ionica (LIT), vengono eseguite anche le ottimizzazioni MS³.

Manual tuning: gli utenti possono eseguire manualmente numerose operazioni di ottimizzazione e calibrazione della risoluzione.

Tuning

Il tuning dello spettrometro di massa è il processo di ottimizzazione della risoluzione e dei parametri dello strumento per ottenere la sensibilità e le prestazioni migliori. Eseguire il tuning e la calibrazione dello spettrometro di massa periodicamente o quando si nota un calo delle prestazioni del sistema. Ottimizzare lo spettrometro di massa per ottimizzare la risposta da un nuovo campione o composto. L'ottimizzazione della risoluzione include la regolazione della larghezza e della forma del picco.

Calibrazione

La calibrazione di massa è il processo di assegnazione dei valori massa-carica corretti (m/z) ai picchi di massa. Quando la calibrazione di massa viene eseguita utilizzando uno standard di calibrazione, ad esempio glicole di polipropilene (PPG), i risultati possono essere confrontati a una calibrazione precedente per determinare quanto sono vicini i valori m/z dei picchi osservati ai valori teorici. La calibrazione precedente può essere aggiornata o, più spesso sostituita con la nuova calibrazione.

Selezionare più masse quando si calibrano le scansioni Q1, Q3 e tutte le scansioni LIT per ciascuna polarità. I risultati sono archiviati in una tabella di calibrazione. Quando viene eseguita una calibrazione di massa, la tabella di calibrazione viene aggiornata con i nuovi valori DAC (digital-to-analog converter) della nuova calibrazione o delle masse già presenti nella tabella di calibrazione. Tutti i dati delle masse non calibrate nell'attuale calibrazione sono mantenuti. Se la calibrazione di massa viene sostituita, vengono sostituiti tutti i valori di calibrazione precedenti per tutte le masse. Eseguire una calibrazione di massa utilizzando uno spettro recentemente acquisito oppure utilizzando uno spettro ricavato da un file di dati memorizzato.

Sintonizzazione e calibrazione automatica

Instrument Optimization è un software di sintonizzazione automatica dello strumento che sintonizza le modalità quadrupolo e LIT ed esegue la calibrazione di massa. Per la modalità quadrupolo, regola gli offset di risoluzione. Per le modalità LIT, ottimizza AF3 e EXB. Per MS³, regola i coefficienti Excitation e Isolation. Selezionare una delle seguenti opzioni delle prestazioni strumento:

- **Verify instrument performance:** testa le prestazioni dello strumento, ma lascia invariate le impostazioni dello strumento. Un report viene generato al termine del test. Utilizzare questa opzione con cadenza settimanale per verificare le prestazioni dello strumento.
- **Adjust mass calibration only:** verifica e regola automaticamente la calibrazione di massa. Se la calibrazione di massa è variata, il software la rettifica. Utilizzare questa opzione con cadenza settimanale per gli strumenti LIT oppure mensilmente per verificare e regolare la calibrazione di massa, se necessario.
- **Adjust instrument settings:** verifica e regola le impostazioni dello strumento e la calibrazione di massa. Le impostazioni dello strumento sono aggiornate da quelle correnti a quelle ottimali. Utilizzare questa opzione se le prestazioni dello strumento sono scarse o

se la forma del picco non è corretta. Solo gli utenti esperti devono regolare le impostazioni dello strumento.

Nota: I vecchi metodi LIT devono essere aggiornati con le nuove impostazioni. Commutare la velocità LIT nella scheda Advanced MS e salvare il metodo.

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** resetta i valori dello strumento ai valori preimpostati in fabbrica. Selezionare questa opzione in caso di sostituzione di un componente di rilievo dello strumento o dopo la prima installazione. *Solo gli utenti esperti dovrebbero utilizzare questa opzione.*

(Opzionale) Backup manuale dei parametri strumento

Eseguire il backup dei parametri strumento attuali qualora sia necessario ripristinarli successivamente. Il percorso preimpostato per i parametri strumento di cui si è eseguito il backup manuale è <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

1. Sulla barra di navigazione, in **Tune and Calibrate**, fare doppio clic su **Instrument Optimization**.
2. Fare clic su **File > Backup Instrument Settings**.
3. Digitare un nome di file.
4. Fare clic su **Save**.

(Opzionale) Ripristino dei parametri strumento

1. Sulla barra di navigazione, in **Tune and Calibrate**, fare doppio clic su **Instrument Optimization**.
2. Fare clic su **File > Restore Instrument Settings File**.
3. Accedere alle impostazioni dello strumento da ripristinare.
4. Fare clic su **Open**.

Ottimizzazione composto

Il Compound Optimization Wizard ottimizza automaticamente un analita. I campioni possono essere introdotti usando l'infusione o la FIA (analisi ad iniezione in flusso). Il software controlla prima la presenza dei composti. Le tensioni dei vari parametri del percorso degli ioni vengono gradualmente aumentate o diminuite per determinare la massima intensità del segnale (scansione Q1) per ciascuno ione. Un file di testo viene generato e mostrato durante il processo di ottimizzazione. Questo file registra i vari esperimenti eseguiti e i valori ottimali per ciascun parametro ottico ionico. Viene generata anche una cartella contenente tutti gli esperimenti eseguiti che può essere trovata aprendo la cartella dei file di dati in modalità

Explore. Per ogni esperimento eseguito, viene generato un metodo di acquisizione che viene salvato nella cartella del metodo di acquisizione.

Analisi mediante iniezione in flusso

L'analisi mediante iniezione in flusso (FIA) è l'iniezione di una piccola quantità di campione da parte dell'autocampionatore nel flusso LC. Durante il processo di ottimizzazione FIA, si eseguono più iniezioni di campione per vari tipi di parametri dipendenti da sorgente o da composto, o entrambi, tipi di parametri che vengono cambiati tra le iniezioni. La FIA ottimizza il potenziale di declustering, l'energia di collisione e il potenziale in uscita dalla camera di collisione eseguendo esperimenti in loop in successione, vale a dire un parametro dipendente dal composto seguito dal successivo parametro dipendente dal composto. Ottimizza i parametri dipendenti dalla sorgente effettuando un'iniezione per ciascun parametro.

Utilizzare l'ottimizzazione FIA per ottimizzare sia i parametri dipendenti dal composto che quelli dipendenti dalla sorgente che utilizzano LC a velocità di flusso più elevate.

Infusione

L'infusione è il flusso continuo del campione a basse velocità di flusso nella sorgente di ionizzazione mediante una pompa a siringa. Durante il processo di ottimizzazione dell'infusione, il software può selezionare gli ioni precursori e gli ioni prodotto e ottimizzare il potenziale di declustering, l'energia di collisione e il potenziale in uscita dalla camera di collisione per entrambi. Le tensioni di questi parametri del percorso degli ioni vengono gradualmente aumentate o diminuite per determinare la massima intensità del segnale per gli ioni precursori e prodotto.

Utilizzare l'ottimizzazione dell'infusione per ottimizzare i parametri dipendenti dal composto solo a portate più basse di quelle utilizzate durante l'analisi LC/MS.

T-Infusion

T-infusion (o infusione suddivisa) è il flusso continuo del campione a basse velocità nella sorgente di ionizzazione attraverso un'unione di terra a tre vie sulla sorgente di ionizzazione. L'unione di terra a tre vie è connessa a una pompa a siringa con una tubazione in PEEK rossa e una pompa LC.

Quando si crea un nuovo file di metodo di acquisizione da un file esistente, è possibile utilizzare alcuni o tutti i metodi del dispositivo nel metodo di acquisizione. Utilizzare Acquisition Method Editor per personalizzare il metodo di acquisizione aggiungendo o rimuovendo metodi di dispositivi. Se l'icona del dispositivo richiesto non è presente nel riquadro Acquisition Method Browser, gli utenti possono aggiungere il dispositivo solo se è incluso nel profilo hardware attivo.

Si consiglia all'utente esperto nello sviluppo dei metodi di creare o modificare metodi di acquisizione e di quantificazione. Per ulteriori informazioni su ruoli e sicurezza, vedere la sezione Informazioni su utenti e ruoli nel documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Dispositivi nei metodi di acquisizione

Creare un metodo di acquisizione per un dispositivo periferico selezionando i parametri operativi per quel dispositivo. I metodi di acquisizione possono essere creati per uno qualunque dei seguenti dispositivi, se sono configurati nel profilo hardware attivo:

- Pompe
- Autocampionatori
- Pompe a siringa
- Forni a colonna
- Valvole di commutazione
- Diode array detector
- Convertitori analogico-digitali
- Sistemi integrati

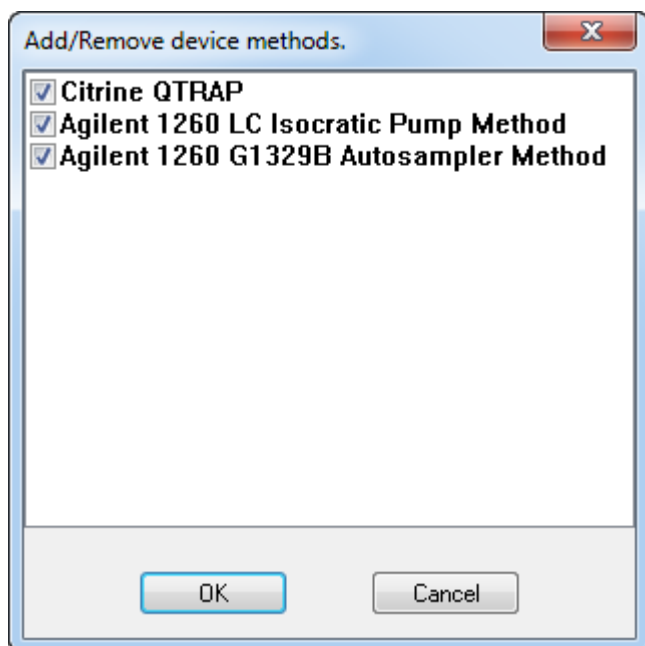
Per ulteriori informazioni sull'impostazione delle proprietà dei dispositivi, fare riferimento al documento: *Guida alla configurazione dei dispositivi periferici*.

Nota: I parametri disponibili per i dispositivi LC variano a seconda del produttore.

Aggiunta o rimozione di un dispositivo periferico

1. Con il file metodo aperto nell'Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, fare clic con il pulsante destro su **Acquisition Method**, quindi fare clic su **Add/Remove Device Method**.
Si apre la finestra di dialogo Add/Remove Device Method, che mostra i dispositivi configurati nel profilo hardware attivo.

Figura 3-1: Finestra di dialogo Add/Remove Device Method



2. Selezionare o deselezionare la caselle di spunta a fianco del metodo dispositivo per aggiungere o eliminare tale metodo.
3. Fare clic su **OK**.

Impostazione delle proprietà della pompa LC

1. Con un file di metodo di acquisizione aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Per la pompa Agilent, fare clic sull'icona **Pump**.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC Controller, fare clic su **Shimadzu LC System**.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, i dispositivi Shimadzu LC 40, i dispositivi ExionLC, i dispositivi ExionLC 2.0 o i dispositivi Jasper LC, fare clic su **LC System**.
2. Selezionare la scheda per la pompa LC nel riquadro a destra se non è già stata selezionata, quindi modificare le proprietà o le impostazioni come necessario.
3. Salvare il file.

Impostazione delle proprietà dell'autocampionatore

1. Assicurarsi che nella scheda Acquisition Properties, il campo **Synchronization Mode** sia impostato su **LC Sync**. Il dispositivo, l'iniezione del campione e l'acquisizione strumento si avvieranno contemporaneamente.
2. Con un file di metodo aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, eseguire una delle seguenti operazioni:

- Per l'autocampionatore Agilent, fare clic sull'icona Agilent Autosampler.
 - Per l'autocampionatore CTC Pal, fare clic sull'icona CTC PAL Autosampler.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC Controller, fare clic su **Shimadzu LC System**.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, i dispositivi Shimadzu LC 40, i dispositivi ExionLC, i dispositivi ExionLC 2.0 o i dispositivi Jasper LC, fare clic su **LC System**.
3. Aprire la scheda Autosampler nel riquadro di destra, quindi modificare le proprietà o le impostazioni secondo necessità.
 4. Salvare il file.

Impostazione delle proprietà della pompa a siringa integrata

Questa procedura riguarda i sistemi dotati di pompa a siringa integrata.

1. Con un file metodo di acquisizione aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition Method Browser, fare clic sull'icona Syringe Pump. Viene mostrata la scheda Syringe Pump Method Properties nel riquadro Acquisition Method Editor.
2. Modificare i campo come richiesto.
3. Salvare il file.

Impostazione delle proprietà del forno a colonna

1. Con un file di metodo di acquisizione aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Per il forno a colonna Agilent, fare clic sull'icona per **Agilent Column Compartment**.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC Controller, fare clic su **Shimadzu LC System**.
 - Per i dispositivi Shimadzu LC 20/30 attivati utilizzando Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, i dispositivi Shimadzu LC 40, i dispositivi ExionLC, i dispositivi ExionLC 2.0 o i dispositivi Jasper LC, fare clic su **LC System**.
2. Selezionare la scheda del forno a colonna nel riquadro a destra se non è già stata selezionata, quindi modificare le proprietà o le impostazioni come necessario.
3. Salvare il file.

Impostazione delle proprietà della valvola di commutazione

La valvola di commutazione può essere utilizzata come deviatore o valvola di iniezione. Selezionare la modalità di sincronizzazione **Manual Sync with Valve** se la valvola viene usata come iniettore. Selezionare le altre modalità se la valvola viene utilizzata come deviatore.

Metodi di acquisizione

1. Con un file di metodo aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, fare clic sull'icona **Valve**
La scheda Valve Properties si apre nel riquadro Acquisition Method Editor.
2. Se necessario, modificare i nomi preimpostati delle posizioni.
La valvola di commutazione è talvolta utilizzata per commutare il flusso di solvente allo scarico o verso una diversa colonna. I nomi preimpostati delle posizioni sono A e B.
 - Nell'elenco **Change Position Names**, selezionare una posizione.
 - Nell'elenco **Change Position Names**, rinominare i nomi delle posizioni preimpostate a seconda del modo in cui è collegata la pompa. Se la valvola viene usata come iniettore, rinominare A e B in Inject e Divert oppure in Column e Waste. Se la valvola viene usata come deviatore, rinominare A e B in Divert e Inject oppure in Waste e Column.
3. Nella colonna **Total Time (min)**, fare clic su una cella e digitare il tempo totale durante il quale la valvola rimarrà in questa posizione.
4. Nella colonna **Position**, fare clic su una cella quindi, nell'elenco **Position**, selezionare la posizione della valvola.
5. Ripetere i passaggi 3 e 4 per ogni interruttore della valvola necessario durante l'acquisizione.
6. Salvare il file.

Impostazione dei parametri del Diode Array Detector (Agilent)

1. Con un file metodo di acquisizione aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, fare clic sull'icona Agilent Diode Array Detector.
La scheda Agilent DAD Method Editor viene aperta nel riquadro Acquisition Method Editor.
2. Modificare le proprietà come richiesto.
3. Salvare il file.

Impostazione delle proprietà del convertitore analogico-digitale

1. Con il file di metodo aperto in Acquisition Method Editor, nel riquadro Acquisition method, fare clic sull'icona Analog to Digital Converter (ADC).
La scheda Analog/Digital Converter Properties si apre nel riquadro Acquisition Method Editor.
2. Nella sezione Sample, nel campo **Rate (pts/sec)**, digitare la velocità.

Nota: L'intervallo e la velocità sono proporzionali l'uno rispetto all'altra. Se si modifica la velocità, il software calcola di nuovo automaticamente l'intervallo.

3. Per impostare i dettagli dei canali, procedere nel seguente modo:

- a. Nel campo **Channels**, fare clic sul nome del canale, quindi selezionare la casella di controllo accanto al nome per includerlo nel metodo.
- b. Nel campo **Interpreted Value @ Full Scale**, digitare il valore appropriato.
- c. Nel campo **Interpreted Unit**, digitare l'unità appropriata.

Il numero di canali disponibili è specificato quando si imposta l'ADC nel profilo hardware.

4. Salvare il file.

Tempo di riempimento dinamico

Il tempo di riempimento dinamico (DFT) è una funzione espressamente studiata per ottimizzare i dati ottenuti in ogni spettro per le funzioni di scansione della trappola ionica lineare. Il DFT regolerà automaticamente il tempo di riempimento utilizzato per riempire la trappola ionica in base al flusso di ioni proveniente dalla sorgente. Per ioni più intensi, il tempo di riempimento diminuirà automaticamente per fare in modo che la trappola non sia eccessivamente riempita di ioni.

Per ioni meno intensi, il tempo di riempimento aumenterà automaticamente, facendo in modo che si ottengano statistiche ioniche corrette nello spettro. DFT è applicabile per i seguenti tipi di scansioni:

- Enhanced MS (EMS)
- Enhanced Resolution (ER)
- Enhanced Product Ion (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

Regolare le impostazioni DFT selezionando **Tools > Settings > Method Options** nel software.

Esperimenti e periodi

Un metodo di acquisizione di uno spettrometro di massa è composto da esperimenti e periodi. Nel riquadro Acquisition Method Browser, creare una sequenza di periodi di acquisizione e di esperimenti per lo spettrometro di massa. In alternativa, aprire un metodo creato in precedenza in Tune Method Editor.

Esperimenti

Un esperimento include le impostazioni dello spettrometro di massa e il tipo di scansione durante una scansione MS. Un set di scansioni MS eseguite per una specifica quantità di tempo viene chiamato periodo. Un metodo di acquisizione nel quale i parametri e le azioni MS sono gli stessi durante tutta la durata è chiamato metodo a singolo esperimento, singolo periodo.

Negli esperimenti sequenziati, le impostazioni MS vengono modificate scansione per scansione. Ad esempio, se un campione contiene due composti, A e B, l'utente potrebbe volere sequenziare un esperimento MS/MS di un composto A con un esperimento MS/MS di

Metodi di acquisizione

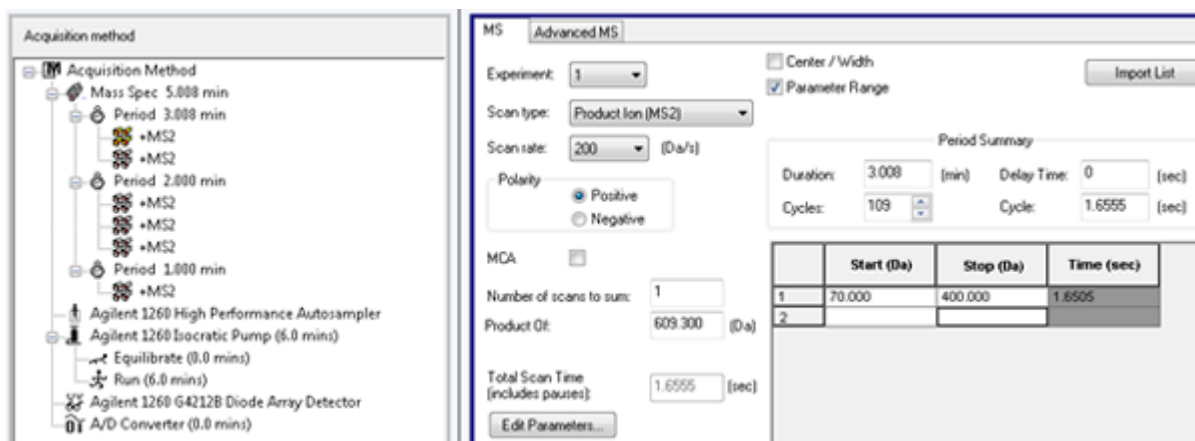
un composto B, per ottenere informazioni su entrambi i composti nella stessa elaborazione. Il metodo dello spettrometro di massa alternerà tra due tipi di scansioni. Altri esempi di esperimenti sequenziati includono l'alternanza tra modalità positiva e negativa in una elaborazione e metodi Acquisizione dipendente da informazione (IDA).

Periodi

Un periodo può contenere uno o più esperimenti in loop. In un metodo di acquisizione multi-periodo, gli esperimenti vengono eseguiti per una determinata quantità di tempo, quindi il software passa a un'altra serie di esperimenti. I periodi sono utili quando il tempo di eluizione dei composti in un'esecuzione LC è noto. Lo spettrometro di massa può eseguire diversi esperimenti in base a quando eluiscono i composti per ottenere più informazioni possibili nella stessa esecuzione.

Nella figura seguente viene mostrato un metodo a tre periodi.

Figura 3-2: Esempio di esperimento multi-periodo



Metodi di acquisizione dipendente da informazione

Un metodo IDA conduce automaticamente esperimenti basati sui risultati ottenuti dai cicli precedenti. Utilizzare i criteri IDA per ottimizzare le impostazioni di acquisizione dati durante questa operazione, per ridurre i tempi di acquisizione dei campioni in una singola iniezione. Con il metodo IDA, gli utenti possono conservare contemporaneamente la quantità di campioni richiesta e tempo di lavoro prezioso.

Creare un metodo IDA con un massimo di due scansioni di indagine e scansioni dipendenti per un massimo di otto picchi più intensi in un singolo periodo. Una scansione di indagine è utilizzata in IDA per avviare ulteriori esperimenti. I seguenti tipi di scansione possono essere usati come scansione di indagine:

- Ione Prodotto migliorato (EPI) (scansione di indagine di secondo livello)
- Enhanced MS (EMS)
- Algoritmo Multiple Reaction Monitoring (MRM) o *Scheduled* MRM

- Perdita neutra (NL)
- Ione precursore (Prec)
- Q3 MS

I seguenti tipi di scansione possono essere usati come scansione dipendente:

- EPI
- MS/MS

Durante un'acquisizione con metodo IDA, le azioni dello spettrometro di massa variano da una scansione all'altra in base ai dati acquisiti durante un ciclo precedente. Il software analizza i dati mano a mano che vengono acquisiti e determina le masse sulle quali eseguire scansioni dipendenti. Gli utenti possono impostare i criteri che attiveranno un esperimento IDA e i parametri di metodo da utilizzare.

L'acquisizione con metodo IDA migliora i risultati eseguendo scansioni dipendenti in base ai seguenti criteri definiti dall'utente:

- Intensità ionica e stato carica
- Elenchi di inclusione ed esclusione
- Schema isotopi
- Esclusione dinamica
- Velocità di variazione dell'intensità ionica (fare riferimento alla sezione: [Algoritmo Dynamic Background Subtraction.](#))

Scheduled Ionization

La funzione Scheduled Ionization può essere utilizzata per ridurre il tempo di inattività dello spettrometro di massa riducendo il rischio di contaminazione. È disponibile in Acquisition Method Editor e può essere utilizzato per l'acquisizione del lotto usando un metodo di acquisizione a singolo periodo. Fare riferimento alla figura seguente.

Figura 3-3: Funzionalità Schedule Ionization in Acquisition Method Editor

The screenshot displays the 'Advanced MS' tab in the Acquisition Method Editor. The 'Scheduled MRM' section is active, showing 'Enabled', 'Basic' selected, and 'Advanced' unselected. The 'Period Summary' section includes fields for Duration (0.000 min), Delay Time (0 sec), Cycles (600), and Cycle (0.0000 sec). The 'Scheduled Ionization' section, highlighted with a red box, contains a checkbox for 'Scheduled Ionization' (checked), and 'Start Time' (0 min) and 'Stop Time' (0 min) fields. Below this is a table with columns: Q1 Mass (Da), Q3 Mass (Da), Dwell Time (msec), and ID. The table has one row with ID '1'. On the left, there are settings for Polarity (Positive selected), Total Scan Time (0.0000 sec), Edit Parameters..., DMS Off, and Ramp COV (Start: -30.000, Stop: 30.000, Step: 0.100).

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Dwell Time (msec)	ID
			1

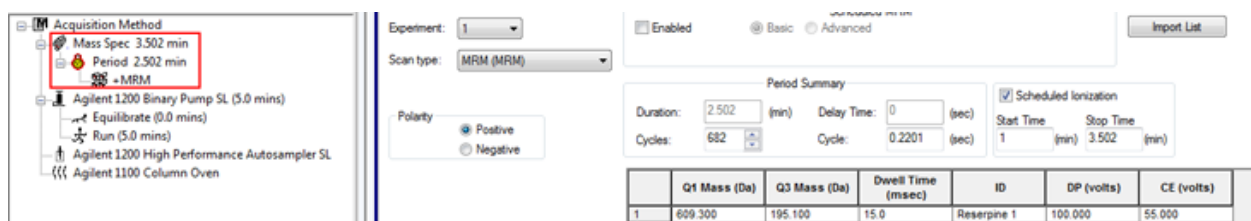
Quando **Scheduled Ionization** è selezionato, e **Start Time** e **Stop Time** per **Scheduled Ionization** sono impostati, **IonSpray Voltage (ISV)** è impostato sul valore **ISV** specificato nel metodo di acquisizione solo tra **Start Time** e **Stop Time** dove i picchi di interesse eluiscono. **ISV** è impostato su 0 prima di **Start time** e dopo **Stop time**. Il metodo LC deve essere impostato come al solito. Ad esempio, se la durata LC è impostata su 5 min, e **Scheduled Ionization** è impostato per iniziare a 1,5 min e arrestarsi a 3,5 min, LC inizia a 0 min e si arresta a 5 min e la raccolta dei dati dello spettrometro di massa inizia a 1,5 min e si arresta a 3,5 min. **Scheduled Ionization** può essere utilizzata per **Nebulizer Current (NC)** as quando una sorgente di ionizzazione Turbo V o IonDrive Turbo V viene usata in modalità APCI.

I valori **Start Time** e **Stop Time** per un metodo di acquisizione con la funzionalità **Scheduled Ionization** selezionata devono essere sviluppati in base ai dati acquisiti usando lo stesso metodo di acquisizione, ma senza la funzionalità **Scheduled Ionization** selezionata.

Nota: **Stop Time** deve essere maggiore di **Start Time**.

Nota: Se la casella di controllo **Scheduled Ionization** è selezionata, l'ora **Mass Spec** è **Stop Time**, ovvero il tempo in cui la ionizzazione deve arrestarsi. L'ora visualizzata accanto a **Period** in Acquisition Method Editor è il valore mostrato nel campo **Duration**. Fare riferimento alla figura seguente.

Figura 3-4: Ora dello spettrometro di massa quando Scheduled Ionization è selezionato



Valori di comprimibilità solvente

Tabella 3-1: Valori di comprimibilità solvente

Solvente	Comprimibilità (10 ⁻⁶ /bar)
Acetone	126
Acetonitrile	115
Benzene	95
Tetracloruro di carbonio	110
Cloroformio	100
Cicloesano	118
Etanolo	114
Acetato etilico	104
Eptano	120
Esano	150
Isobutanolo	100
Isopropanolo	100
Metanolo	120
1-propanolo	100
Toluene	87
Acqua	46

Dimensione siringa rispetto alla portata

La portata di una pompa a siringa dipende dalla siringa installata nella pompa. La tabella seguente mostra il rapporto tra la porta e la dimensione delle siringa.

Tabella 3-2: Dimensione siringa e portata in L/ora

Syringe Size (µL)	L/ora minimi	L/ora massimi
0,5	0,002	23,8
1,0	0,003	47,8
2,0	0,006	95,2
5,0	0,015	238,0
10,0	0,029	474,0
25,0	0,073	1193,0

Tabella 3-3: Dimensione siringa e portata in µL/minuto

Syringe Size (µL)	µL/minuto minimi	µL/minuto massimi
50	0,002	39,7
100	0,005	79,7
250	0,012	197,8
500	0,024	397,0
1.000	0,048	795,0
1,0	0,049	805,0

Tabella 3-4: Dimensione siringa e portata in mL/ora

Dimensione siringa (mL)	mL/ora minimi	mL/ora massimi
2,0	0,011	186,8
2,5	0,010	168,2
3,0	0,011	181,4
5,0	0,019	317,0
10,0	0,028	461,0
20,0	0,050	821,0
30,0	0,074	1208,0

Tabella 3-5: Dimensione siringa e portata in mL/minuto

Dimensione siringa (mL)	mL/minuto minimi	mL/minuto massimi
50,0	0,002	28,40
100,0	0,003	47,60
140,0	0,004	55,10

Un lotto è una collezione di informazioni sui campioni da analizzare. I campioni vengono in genere raggruppati in set per semplificare l'invio. Raggruppare i campioni in un set riduce anche la quantità di dati che deve essere digitata manualmente. Un set può comprendere un campione singolo o più campioni. Tutti i set in un lotto utilizzano lo stesso profilo hardware. Tuttavia, i campioni di un set possono avere metodi di acquisizione diversi. Un lotto può essere inviato solo da una stazione di acquisizione.

I lotti includono le seguenti informazioni:

- Informazioni sui campioni come nome, ID, nome file di dati e commento
- Posizione dell'autocampionatore (informazioni rack), posizione fiala
- Metodi di acquisizione e volume di iniezione
- Metodo di quantificazione (opzionale)
- Informazioni di quantificazione (opzionale)
- Dati campioni personalizzati (opzionale)
- Informazioni sul set

Batch Editor

Utilizzare Batch Editor per creare o modificare lotti e creare modelli di lotto. Per eseguire i campioni, ciascuno utilizzando un metodo di acquisizione differente, selezionare più metodi di acquisizione nello stesso set.

Un metodo di acquisizione può essere utilizzato anche come modello. In questo caso, lo stesso metodo viene utilizzato per ciascun campione, ma l'utente può selezionare masse o range di massa diversi per ciascun campione. Batch Editor può essere utilizzato anche per importare elenchi di campioni creati in programmi esterni, come Microsoft Excel.

L'utente può modificare ogni dettaglio del lotto prima di inviarlo per l'elaborazione. Quando un lotto viene inviato per l'analisi, l'utente può inviare l'intero lotto, set specifici all'interno del lotto, o campioni specifici all'interno di un set.

Ad esempio, per analizzare dieci campioni, cinque utilizzando un metodo di acquisizione e cinque utilizzando un metodo di acquisizione differente, creare un lotto di due set, uno per ciascun metodo utilizzato.

Nota: Si consiglia all'utente di rivedere tutti i parametri del lotto prima di inviarlo per verificare che le posizioni del rack, della piastra e della fiala corrispondano alle impostazioni hardware nell'autocampionatore e che l'opzione per l'impostazione del rack Specify rack sia disponibile nel metodo di acquisizione e selezionata per l'autocampionatore utilizzato.

Nota: Si consiglia all'utente di verificare che il rack e la piastra corretti, con le posizioni dei campioni corrette, vengano caricati nell'autocampionatore prima che il lotto venga inviato.

Tabella 4-1: Schede di Batch Editor

Scheda	Descrizione
Campione	Utilizzato per creare l'elenco campioni e per selezionare i dettagli dei campioni, come il nome campione e il metodo di acquisizione, da utilizzare per acquisire il campione.
Locations	Utilizzato per selezionare le posizioni dei campioni nell'autocampionatore. Le posizioni dei campioni possono essere specificate numericamente nella scheda Sample. Tuttavia, la scheda Locations fornisce un'interfaccia grafica per selezionare le posizioni dei campioni.
Quantificazione	Utilizzato per selezionare i tipi di campione e le concentrazioni per i lotti di quantificazione. Poiché le informazioni di quantificazione possono essere specificate dopo l'acquisizione nella Results Table di quantificazione, gli utenti non devono utilizzare la scheda Quantitation in Batch Editor. Invece, è possibile utilizzare il Quantitation Wizard.
Submit	Utilizzato per verificare le informazioni sui campioni e per inviare i campioni alla coda di acquisizione. Il Queue Manager mostra lo stato della coda, del lotto e del campione e permette agli utenti di gestire i campioni nella coda.

Importazione di file di lotto

Gli utenti possono importare un file di testo contenente informazioni sul lotto invece di creare un lotto in Batch Editor. Se tutti i dettagli campione si trovano in un foglio elettronico, la disposizione e l'importazione dei dati nel foglio elettronico sono più rapide rispetto alla digitazione manuale dei dati in Batch Editor.

Prima di importare le informazioni del lotto da un file di testo, verificare che i dati contenuti nel file siano correttamente organizzati e formattati. In particolare, le intestazioni delle colonne sul foglio di calcolo devono corrispondere a quelle delle colonne di Batch Editor. Per essere certi che il file di testo includa le opportune intestazioni, creare un lotto utilizzando Batch Editor, esportarlo come file di testo, digitare i valori appropriati in un editor di foglio di calcolo e reimportare il file in Batch Editor.

Per ottenere esempi di file formattati correttamente, fare riferimento alla cartella Batch nel progetto Example.

Le informazioni presenti in un file di lotto possono essere esportate per essere utilizzate anche con altre applicazioni, ad esempio Microsoft Excel, Microsoft Access e alcuni software LIMS (Laboratory Information Management System).

Impostazione dei dettagli di quantificazione in Batch Editor (opzionale)

Se si utilizza un metodo di quantificazione con un lotto e se l'utente non vuole selezionare i dettagli di quantificazione dopo l'acquisizione, i dettagli di quantificazione (tipo di campione, concentrazione del campione) devono essere definiti prima dell'invio del lotto.

Le colonne **Internal Standard** e **Standard** appropriate vengono mostrate nella scheda Quantitation in base al metodo di quantificazione selezionato nella scheda Sample.

1. Con un file di lotto aperto nella finestra Batch Editor, aprire la scheda Quantitation.
2. Selezionare il gruppo contenente i campioni.
3. Selezionare **Quant Type**, **Dilution Factor** e **Weight/Volume** per tutti i campioni dall'elenco nella cella.
4. (Se necessario) Nella colonna **Analyte**, digitare la concentrazione di analita.
5. (Se necessario) Nella colonna **Internal Standard**, digitare la concentrazione di standard interno.
6. Ripetere questa procedura per ciascun gruppo del lotto.

L'utente può visualizzare le informazioni contenute in un file di dati sotto forma di tabella o di grafico. I dati grafici sono presentati sotto forma di un cromatogramma o di uno spettro. I dati in questi formati possono essere visualizzati come una tabella di punti di dati e su di essi è possibile eseguire diverse operazioni di ordinamento.

Il software memorizza i dati TIC e i dati del metodo in file wiff e memorizza i dati dello spettro in file wiff.scan. Il software necessita di entrambi i file wiff e wiff.scan per aprire il file di dati. Inoltre, il software può aprire file txt che contengono dati per un solo campione. Quando un file di dati viene aperto nel software, vengono mostrati diversi riquadri, a seconda del tipo di esperimento eseguito.

Se la casella di controllo MCA viene selezionata in Tune Method Editor, il file di dati apre uno spettro di massa. Se la casella di controllo MCA non viene selezionata, il file di dati apre un cromatogramma a corrente ionica totale (TIC). L'utente può selezionare un intervallo e fare doppio clic sul riquadro TIC in un momento specifico per mostrare lo spettro per questo intervallo.

Cromatogrammi

Un cromatogramma mostra la variazione di una certa quantità rispetto al tempo in un esperimento ripetitivo. Ad esempio, quando lo spettrometro di massa 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 spettrometro di massa, ma dagli spettri.

Nella visualizzazione del cromatogramma, l'intensità, in conteggi al secondo (cps), viene mostrata sull'asse Y, mentre l'ora viene mostrata sull'asse X. I picchi vengono etichettati in modo automatico.

Nel caso della LC/MS, il cromatogramma viene spesso visualizzato come funzione del tempo, ovvero il tempo in cui è stata ottenuta una scansione specifica, che può essere ottenuta dal numero della scansione.

Un cromatogramma offre una visione generale dei dati, che dipendono solitamente dal tempo quando si utilizza una colonna LC, ma fornisce informazioni sui componenti di un picco. Ad esempio, benché un cromatogramma possa mostrare un solo picco, tale picco può rappresentare più di un composto, ovvero masse diverse.

I dati cromatografici possono variare nel tempo e nell'intensità se le condizioni cromatografiche di un determinato campione cambiano.

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

Per gli spettri MRM, l'intensità è associata a due masse: la massa ionica precursore (Q1) e la massa (o le masse) ionica del prodotto (Q3).

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 o MCA viene utilizzato per l'acquisizione, i dati vengono visualizzati sotto forma di spettro.
- Da un cromatografo.

Sottrazione di fondo

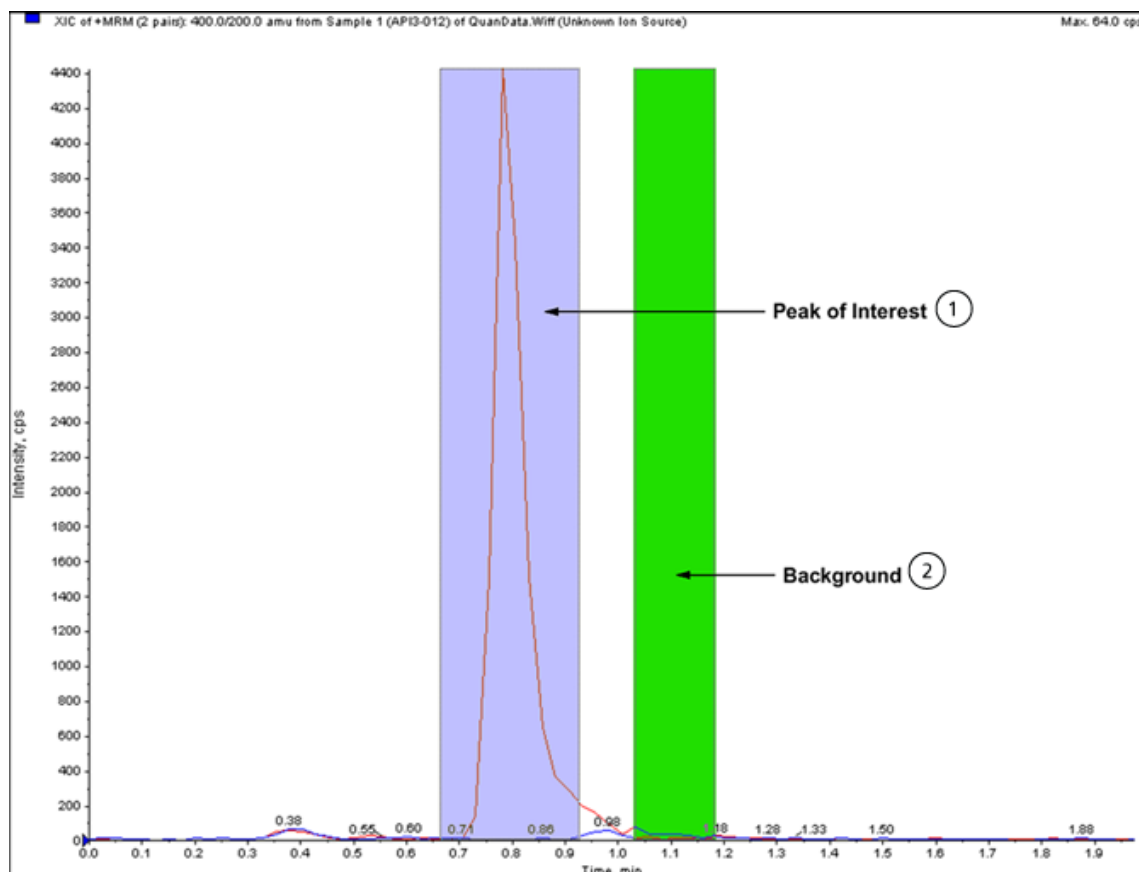
La sottrazione di fondo riduce la quantità di rumore di fondo in uno spettro, sottraendo uno o due range contenenti rumore di fondo da un range contenente un picco. Gli utenti possono spostare i range in maniera indipendente, oppure bloccarli e spostarli come una singola entità all'interno del grafico per ottimizzare l'isolamento del picco o per isolare un altro picco. L'impostazione predefinita è Locked Background Subtract. Il software propone vari metodi di sottrazione in background.

Background Subtract: gli utenti possono utilizzare la sottrazione di fondo per isolare un picco di interesse. Gli utenti possono evidenziare e sottrarre fino ad un massimo di due range dal picco. Gli utenti possono anche bloccare i range e spostarli all'interno del grafico per ottimizzare l'isolamento del picco oppure per isolare un altro picco.

Esecuzione di una sottrazione del fondo per un cromatogramma

1. Aprire un file di dati.
2. Selezionare un intervallo di fondo nel cromatogramma.
3. Premere **Shift** e selezionare un altro range del fondo.

Figura 5-1: XIC



Elemento	Descrizione
1	Picco di interesse
2	Fondo

4. Per impostare il range di sottrazione, fare clic su **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**.
5. Selezionare il picco di interesse.
6. Fare clic su **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**. Il fondo viene sottratto dal picco e viene generato un nuovo spettro.
7. Per isolare un altro picco, trascinare i range bloccati nel cromatogramma e ripetere la sottrazione del fondo.

Suggerimento! Per eliminare la regione di sottrazione in background, fare clic su **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

8. Per salvare lo spettro sottratto del fondo come file di dati elaborato, fare clic su **File > Save Processed Data File**.

Sblocco degli intervalli

Prerequisito
<ul style="list-style-type: none">L'intervallo di sottrazione selezionato è impostato sul blocco.

Fare clic su **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Gli intervalli sono sbloccati e possono essere spostati in modo indipendente.

Sottrazione di base

La sottrazione di base rimuove una costante o un offset che varia lentamente da una serie di dati. Questa funzionalità è utile per individuare picchi piccoli oscurati dal rumore. Il software utilizza il seguente algoritmo per eseguire una sottrazione di base.

- Ciascun punto di dati nella serie di dati viene considerato come il centro di una finestra (in massa o tempo) con una larghezza definibile dall'utente misurata in amu o minuti.
- Vengono individuati i valori minimi su uno dei lati del punto di dati attuale (valori minimi) all'interno della finestra.
- Una linea retta viene tracciata tra i due valori minimi e viene calcolata l'altezza (intensità) del punto dati attuali sopra la linea. I punti finali dei dati vengono considerati come valori minimi.
- Il punto dati viene sostituito con il nuovo valore calcolato.

Calcolatori

Usare un calcolatore per eseguire calcoli sulla base dei dati raccolti. Sebbene il calcolatore sia una finestra separata, è collegato al grafico attivo all'interno del software.

Sono disponibili i seguenti calcolatori:

- [Calcolatore Elemental Composition](#)
- [Calcolatore HyperMass](#)
- [Calcolatore Elemental Targeting](#)
- [Calcolatore Mass Property](#)
- [Calcolatore Isotopic Distribution](#)

Gli utenti possono tagliare e incollare da una casella di testo all'altra tra le diverse finestre del calcolatore. I dati generati dai calcolatori possono essere stampati facendo clic sull'icona **Print** nell'angolo in alto a sinistra della finestra. Per ulteriori informazioni sull'uso dei calcolatori, fare riferimento alla Guida.

I dati generati dai calcolatori Elemental Composition, Mass Property e Isotopic Distribution possono essere esportati in un file separato. Utilizzare il calcolatore Elemental Targeting per modificare i dati nel grafico attivo. I dati derivati dai calcolatori HyperMass e Isotopic Distribution possono essere sovrapposti sullo spettro attivo.

Suggerimento! Impostare la precisione dei dati calcolatore nella scheda Calculators della finestra di dialogo Appearance Options. Per aprire la finestra di dialogo, fare clic su **Tools > Settings > Appearance Options**

Calcolatore Elemental Composition

Il calcolatore Elemental Composition determina il potenziale molecolare o la composizione degli amminoacidi in base ad un rapporto massa-carica di riferimento. Digitare manualmente questo rapporto o selezionarlo da uno spettro attivo. Questo calcolatore crea una tabella con la combinazione possibile di elementi o amminoacidi mettendo insieme la massa di interesse e le caratteristiche di ciascuno.

Digitare o selezionare i valori per i parametri relativi a tolleranza, stato degli elettroni e numero di cariche. Gli utenti possono anche digitare un elenco di possibili elementi e inserire un limite nel numero di ciascuno di essi.

Calcolatore HyperMass

Il calcolatore HyperMass determina la distribuzione di una busta a carica multipla in base ad una massa non caricata. Gli utenti possono selezionare la massa non caricata, compresi l'addotto e la sua polarità.

Il calcolatore mostra una rappresentazione grafica della serie HyperMass, che è possibile sovrapporre sullo spettro attivo. È disponibile anche un elenco dei dati HyperMass.

Calcolatore Elemental Targeting

Il calcolatore Elemental Targeting riduce lo spettro dei dati in base ad un pattern specifico, principalmente quello corrispondente alle distribuzioni isotopiche. Può cercare anche uno spettro di dati MS per un determinato pattern di picchi, che può essere inserito come formula o come distribuzione isotopica.

Se il calcolatore trova una corrispondenza, crea un diagramma ridotto contenente solo i dati relativi al pattern specificato. Per uno spettro, il calcolatore rimuove tutti i dati senza riscontro. Per un cromatogramma, il calcolatore calcola il target elementale per ciascuno spettro sottostante e rigenera ciascun punto nel cromatogramma sulla base di questi nuovi spettri.

Calcolatore Mass Property

Il calcolatore Mass Property determina varie proprietà, come massa esatta, massa media, accuratezza di massa e difetto di massa di una massa di interesse. I risultati generati da questo calcolatore dipendono dal numero immesso di campi completati.

Calcolatore Isotopic Distribution

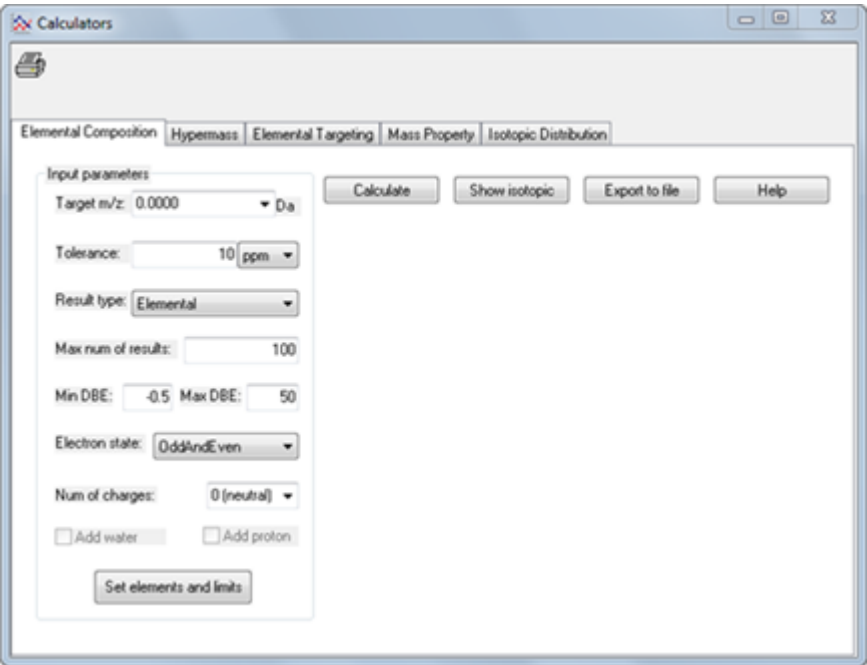
Il calcolatore Isotopic Distribution determina la distribuzione isotopica in base ad una formula inserita. Ciò consente agli utenti di distinguere tra i composti con la stessa massa in base alle intensità relative degli isotopi.

La distribuzione isotopica calcolata può essere visualizzata in formato grafico o testo nel riquadro Isotopic Distribution, sovrapposta sullo spettro attivo o esportata in un file separato.

Accesso ai calcolatori

Fare clic su **Tools > Calculators**.

Figura 5-2: Finestra di dialogo Calculators



Viene visualizzata la finestra di dialogo Calculators.

Picchi centroidi

Il calcolo del centroide di un picco converte i valori di distribuzione dei picchi in un singolo valore di m/z e di intensità che rappresenta il picco. I dati centroidi raccolti nella modalità Profile semplifica i dati e riduce le dimensioni dei file. I dati centroidi garantiscono un'assegnazione più precisa dei picchi e riduce la quantità di dati, ma elimina anche le informazioni sulla forma dei picchi.

L'algoritmo del centroide converte i picchi in singoli valori utilizzando un'intensità ponderata per calcolare il centro di gravità del picco. L'output dell'algoritmo è un elenco di picchi di parametri, come illustrato nella seguente tabella.

Tabella 5-1: Parametri del picco

Parametro	Definizione
Centroid Value	Il valore dei dati centroidi espresso in unità di massa o di tempo.
Intensità	L'intensità di ogni picco in cps.

Tabella 5-1: Parametri del picco (continua)

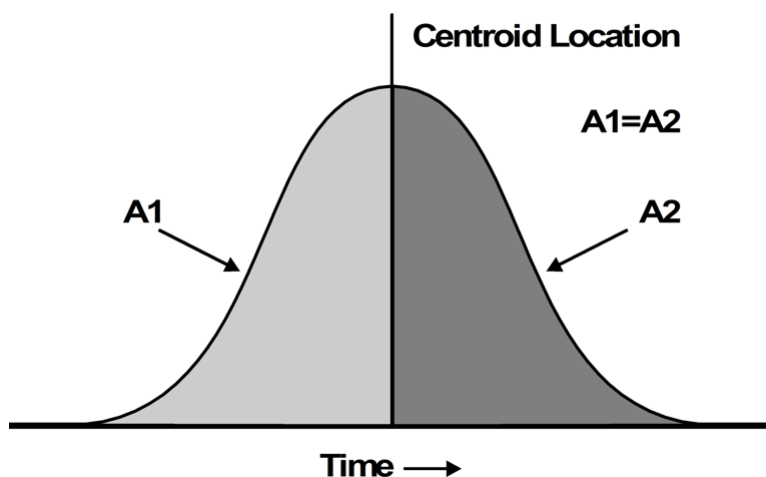
Parametro	Definizione
Larghezza	La larghezza del picco centroide in Da.

I dati vengono calcolati automaticamente come centroide quando vengono aggiunti in una libreria o quando viene condotta una ricerca.

Calcolo del centroide di un picco

1. Selezionare un riquadro contenente uno spettro.
Il calcolo del centroide del picco modifica l'aspetto del grafico esistente. Per confrontare il risultato con i dati originali, fare una copia del grafico prima di calcolare il centroide.
2. Fare clic su **Explore > Centroid**.
I dati sono centroidi.

Figura 5-3: Posizione centroide analita



Analisi dei dati

Gli utenti possono aprire file contenenti dati esistenti oppure dati in corso di acquisizione. È inoltre possibile visualizzare tutti i dati relativi all'esperimento in forma tabellare. Il riquadro tabella si compone di due schede: Data List e Peak List. La scheda Data List contiene informazioni relative all'esperimento, come il tempo di acquisizione e l'intensità di scansione. La scheda Peak List contiene informazioni relative ai picchi, come l'altezza picco, l'area picco e il tipo di baseline.

Cromatogramma ionico totale

Un cromatogramma corrente ionica totale (TIC) è creato sommando i contributi di intensità di tutti gli ioni di una serie di scansioni di massa. Gli utenti possono utilizzare il TIC per

visualizzare un intero set 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. Se i dati contengono risultati di più esperimenti, è possibile creare singoli TIC per ciascun esperimento ed un altro TIC che rappresenti la somma di tutti gli esperimenti. Il TIC preimpostato che rappresenta la somma di tutti gli esperimenti viene mostrato con uno strumento splitter sotto il centro dell'asse X.

Cromatogramma a ioni estratti

Un cromatogramma a ioni estratti (XIC) viene 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 intervallo di massa. Mostra il comportamento di una determinata massa, o range di massa, in funzione del tempo. L'intensità dello ione o le intensità sommate di tutti gli ioni in un determinato range sono tracciate in un riquadro cromatografico.

Cromatogramma picco di base

Un cromatogramma picco di base (BPC) mostra l'intensità dello ione più intenso in ogni scansione come funzione del numero di scansione o del tempo di ritenzione. È utile nei casi in cui il TIC è talmente dominato dal rumore da creare un offset ampio e da rendere difficili da distinguere i picchi cromatografici. È utile anche per fare la distinzione tra componenti di co-eluzione. I BPC possono essere generati solo a partire dai dati di un singolo periodo e un singolo esperimento.

Il grafico utilizza due colori, alternando ogni volta la massa delle variazioni del picco di base. Le variazioni di colore sono mantenute quando si manipolano i dati tramite scorrimento o zoom. Per informazioni sulla selezione dei colori utilizzati nel grafico, fare riferimento alla Guida.

Cromatogramma a lunghezze d'onda estratte

Un cromatogramma a lunghezze d'onda estratte (XWC) è un cromatogramma di lunghezze d'onda creato in base ai valori di intensità ad una singola lunghezza d'onda, oppure alla somma dell'assorbanza per un range di lunghezze d'onda.

Diode Array Detector

Gli utenti possono visualizzare lo spettro del Diode Array Detector (DAD) per un singolo momento nel tempo, o per un intervallo di tempo, come cromatogramma della lunghezza d'onda totale.

Cromatogramma lunghezza d'onda totale

Un cromatogramma lunghezza d'onda totale (TWC) è un cromatogramma di utilizzo meno corrente. Mostra l'assorbanza totale (mAU) in funzione del tempo. Utilizzare il TIC per visualizzare un intero gruppo di dati in un singolo riquadro. Consiste nella somma delle assorbanze di tutti gli ioni in una scansione, tracciate rispetto al tempo in un riquadro cromatografico. Se i dati contengono risultati di più esperimenti, è possibile creare singoli TWC per ciascun esperimento e un altro TIC che rappresenti la somma di tutti gli esperimenti.

Sovrapposizione dei grafici

È possibile confrontare visivamente due o più gruppi di dati sovrapponendo i grafici creati con metodi analoghi. Ogni singolo spettro si distingue per il colore della sua traccia. Per i dati Full Scan, questo consente di visualizzare le differenze tra vari spettri di campioni.

Se si scelgono uno o più riquadri, ogni XIC si aprirà in un riquadro separato.

Suggerimento! Per sovrapporre meno di quattro grafici nello stesso riquadro, premere **Ctrl**, fare clic con il pulsante destro del mouse in un riquadro, quindi fare clic su **Appearance Options**. Nella finestra di dialogo Appearance Options, nella scheda Multiple Graph Options, selezionare **Yes** per i campi **Overlay Multiple Panes** per **Spectrum** e **Chromatogram**.

1. Selezionare il primo riquadro che si desidera sovrapporre.
2. Fare clic su **Explore > Overlay**.
3. Fare clic nel secondo riquadro.

I grafici vengono sovrapposti, mostrando le due tracce in colori diversi.

Suggerimento! Per visualizzare un elenco con la codifica a colori dei grafici sovrapposti, fare clic con il pulsante destro sulla barra titolo del riquadro.

Commutazione tra i grafici sovrapposti

1. Selezionare un riquadro contenente grafici sovrapposti.
2. Fare clic su **Explore > Cycle Overlays**.
La videata cambia affinché il grafico successivo nella sequenza appaia in secondo piano.

Sum Overlays

Se due o più grafici sono sovrapposti, gli utenti possono sommare i grafici per ottenere una nuova traccia. Ciascun punto della nuova traccia è la somma dei punti dei grafici. La somma di più sovrapposizioni di dati di tipo analogo può facilitare e accelerare le successive operazioni di elaborazione. Ad esempio, gli utenti possono sovrapporre vari XIC, sommarli ed infine smussare la sovrapposizione così sommata per eliminare il rumore di fondo.

La somma delle sovrapposizioni è simile alla generazione di un TIC, con il vantaggio di potere scegliere quali grafici sovrapporre. Ad esempio, se vengono visualizzati dieci esperimenti, il TIC li aggiunge insieme. Se le sovrapposizioni vengono sommate, gli utenti hanno la possibilità di aggiungere solamente nove grafici sovrapposti su dieci. Questa procedura può essere usata se i dati raccolti nell'esperimento uno comprendono solo rumore di fondo.

1. Sovrapporre i grafici che devono essere sommati.
2. Fare clic su **Explore > Sum Overlays**.
I grafici sovrapposti vengono aggiunti insieme.

Personalizzazione dei grafici

I grafici possono essere personalizzati usando lo stile preimpostato per le etichette, le didascalie o i testi in grafici e cromatogrammi. Gli utenti possono selezionare i font da utilizzare per le etichette picchi e assi, nonché i colori da utilizzare per le tracce. Gli utenti possono aggiungere anche etichette assi e il tipo di etichetta e la precisione per i picchi.

Aggiunta di didascalie a un grafico

Utilizzare didascalie per etichettare picchi di interesse o punti significativi sul grafico. Quando si inserisce una didascalia accanto a un picco, la didascalia rimane ancorata al picco quando il grafico viene ingrandito o ridotto. Le didascalie rimangono con il campione originale anche quando l'utente si sposta tra i campioni in un file di dati. Una didascalia contiene una riga di testo, con un massimo di 128 caratteri.

1. Nello spettro, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su **Add Caption**. Si apre la finestra di dialogo Add Caption.
2. Nella casella **Caption**, digitare il testo.
3. Per modificare le dimensioni e lo stile della didascalia, fare clic su **Font**.
4. Per posizionare la didascalia, fare clic su **OK**.

Suggerimento! Se la posizione della didascalia non soddisfa, trascinarla in un'altra posizione. La didascalia rimane nello stesso posto in relazione agli assi X e Y quando il grafico viene ingrandito o ridotto. Per modificare o cancellare la didascalia, fare clic con il pulsante destro su di essa e poi fare clic sul comando desiderato.

Aggiunta di testo in un grafico

Utilizzare del testo per aggiungere più righe di informazioni in un grafico. Diversamente dalle didascalie, che sono associate ad un picco specifico e si spostano con esso durante lo zoom del grafico, le etichette di testo rimangono nella loro posizione originale in caso di zoom del grafico. Esse non rimangono con il campione originale anche quando gli utenti si spostano tra i campioni in un file di dati.

1. Nel grafico, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su **Add User Text**. Si apre la finestra di dialogo Add User Text.
2. Nel campo **User Text**, digitare il testo.
3. Per centrare il testo, selezionare la casella di controllo **Center Text**.
4. Per modificare le dimensioni e lo stile della didascalia, fare clic su **Font**.
5. Per inserire il testo, fare clic su **OK**.

Suggerimento! Se la posizione del testo non soddisfa, trascinarlo in un'altra posizione. Per modificare o cancellare il testo, fare clic con il pulsante destro su di esso e poi fare clic sul comando desiderato.

Compound Database

Il database dei composti memorizza le informazioni relative ai composti, incluse le specifiche delle ottimizzazioni. Utilizzare il database dei composti quando è presente un numero elevato di campioni e quando è necessario ottimizzare rapidamente un numero elevato di composti. La finestra Compound Database memorizza le condizioni ottimizzate per i composti, condizioni che possono essere recuperate per eseguire i campioni. *Per ulteriori informazioni, fare riferimento al documento: Guida.*

Contour Plot

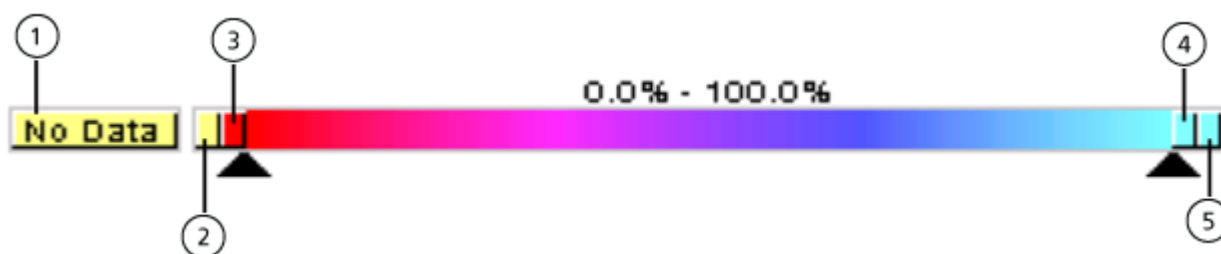
Un Contour Plot è un plot con codifica a colori di un gruppo di dati completo, che utilizza i colori per rappresentare una terza dimensione nel plot. In un Contour Plot di un TIC, l'asse X rappresenta il tempo di ritenzione o il numero della scansione, mentre l'asse Y rappresenta la massa e il colore rappresenta l'intensità dei dati in quel punto. In un Contour Plot di un TWC per dati DAD, l'asse X rappresenta il tempo di ritenzione o il numero della scansione, mentre l'asse Y rappresenta la lunghezza d'onda e il colore rappresenta l'assorbanza. Il Contour Plot è uno strumento di post-acquisizione che non funziona in un'acquisizione di scansioni in tempo reale.

Nota: Il Contour Plot non supporta le scansioni MI o MRM, ma supporta le scansioni DAD.

Il colore è il terzo asse nel Contour Plot e rappresenta l'intensità o l'assorbanza. Gli utenti possono modificare i valori alti e bassi dell'intensità e dell'assorbanza in Contour Plot, utilizzando i triangoli di controllo sulla barra colori sopra il Contour Plot. I parametri percentuali nella parte superiore del riquadro Contour Plot indicano i valori delimitati dai cursori basso e alto. I valori effettivi sono basati su una percentuale dell'intensità massima o dell'assorbanza nell'area selezionata. Il valore compare nell'angolo superiore destro del riquadro Contour Plot.

I comandi mostrati nella seguente figura cambiano i colori in un Contour Plot.

Figura 5-4: Pulsanti di controllo dei colori Contour Plot



Elemento	Descrizione
1	No data
2	Below low data
3	Low data

Elemento	Descrizione
4	High data
5	Above high data

Gli utenti possono definire i colori su un grafico Contour Plot per fornire un contrasto migliore e mostrare le specifiche dei dati in base alle relative esigenze. Ad esempio, impostando l'intensità/lunghezza d'onda e modificando il colore dei valori per **Below Low Data** e **Above High Data** possono eliminare il rumore di fondo in un Contour Plot.

I pulsanti **Below Low Data** e **Above High Data** si restringono e si espandono sulla barra colori quando vengono spostati i comandi cursore. Quando si modificano i colori del Contour Plot, i nuovi colori diventano quelli preimpostati per tutti i grafici successivi.

Tabella 5-2: Menu del pulsante destro per i riquadri del Contour Plot

Comando	Funzione
Show DAD Spectrum	(Mostra spettro DAD) Apre un nuovo riquadro con lo spettro DAD.
Extract Wavelengths (Use Range)	(Estrai lunghezze d'onda (Utilizza range)) Estrae fino a tre range di lunghezze d'onda da uno spettro DAD per mostrare XWC.
Extract Wavelengths (Use Maximum)	(Estrai lunghezze d'onda (Utilizza massimo)) Estrare i range di lunghezze d'onda utilizzando le lunghezze d'onda massime.
Zoom to selection	(Zoom sulla selezione) Esegue lo zoom avanti sull'area selezionata.
Add User Text	(Aggiungi testo utente) Aggiunge una casella di testo nella posizione del cursore.
Undo Zoom	(Annulla zoom) Reimposta il grafico sulla scala originale.
Delete Pane	(Elimina riquadro) Elimina il riquadro selezionato.
Show Cross-Hair	(Mostra mirino) Mostra il mirino (nm/min).

Visualizzazione di un Contour Plot

È possibile visualizzare un Contour Plot solo dopo l'acquisizione. Gli utenti possono visualizzare un Contour Plot dai grafici TIC, XIC, TWC o XWC. TIC e XIC sono disponibili per tutti i file di dati wiff. TWC e XWC sono disponibili solo per i dati acquisiti tramite un DAD o DAD.

1. In modalità Explore, aprire un file di dati sotto forma di grafico TIC, XIC, TWC, o XWC.
2. Evidenziare l'intervallo da visualizzare nel Contour Plot. Quando non si effettua una selezione, viene visualizzato l'intervallo intero.

3. Fare clic su **Explore > Show > Show Contour Plot**.
Un Contour Plot dell'area selezionata si apre in un riquadro separato.

Suggerimento! Per chiudere un riquadro Contour Plot, fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro Contour Plot e fare clic su **Delete Pane**.

Selezione di un'area in un Contour Plot

Per ingrandire una determinata selezione oppure visualizzare lo spettro di massa corrispondente per quella selezione, procedere come segue:

- Per selezionare un'area standard all'interno di una casella, trascinare il puntatore per creare una casella intorno ad un'area nel Contour Plot.
- Per effettuare una selezione verticale, premere **Ctrl** e trascinare il puntatore verticalmente.
- Per effettuare una selezione orizzontale, premere la barra spaziatrice e trascinare il puntatore orizzontalmente.

Impostazione dell'intensità e dell'assorbanza in un Contour Plot

Eseguire una delle seguenti operazioni:

- Per impostare il valore basso di intensità/assorbanza in un Contour Plot, dalla barra colori sopra il Contour Plot trascinare il cursore triangolare sinistro nella posizione richiesta.

Il Contour Plot regola automaticamente il colore dei valori sotto l'impostazione per indicare che non rientrano nell'intervallo.
- Per impostare il valore assorbanza/intensità elevata in un Contour Plot, dalla barra colori sopra il Contour Plot, trascinare il cursore triangolare destro nella posizione richiesta.

Il Contour Plot regola automaticamente il colore dei valori sopra l'impostazione per indicare che non rientrano nell'intervallo.

Modifica dei colori in un Contour Plot

Suggerimento! Utilizzando la tavolozza Define Custom Colors, gli utenti possono creare colori personalizzati da usare in un Contour Plot.

1. Nel riquadro Contour Plot, fare clic su uno dei pulsanti colore.
Si apre la finestra di dialogo Color.

Nota: Cinque pulsanti controllano il colore in un Contour Plot. Ognuno mostra il nome quando il cursore rimane sul pulsante. In questo modo, si è certi di modificare la funzione corretta. Inoltre, i pulsanti Below Low Data e Above High Data si comprimono e si espandono sulla barra colori se l'utente sposta i comandi del cursore. Dopo che l'utente ha modificato i colori del contour plot, questi diventano i colori predefiniti di tutti i grafici successivi.

2. Fare clic su un colore.

3. Fare clic su **OK**.

Il grafico cambia per tenere conto della variazione di colore.

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.

Fragment Interpretation

Lo strumento Fragment Interpretation aiuta l'utente a interpretare i dati MS/MS. Lo strumento Fragment Interpretation genera un elenco di masse di frammenti teorici dalla scissione di un singolo legame non ciclico di una struttura molecolare. È possibile creare la struttura molecolare in un programma di disegno di terze parti per poi salvarla come file mol. Lo strumento può quindi abbinare l'elenco teorico con i picchi dello spettro di massa attuale. Fragment Interpretation mostra i frammenti teorici nell'elenco frammenti e confronta le masse di frammenti con i picchi nello spettro di massa. I picchi che superano la soglia di intensità e rientrano nella tolleranza di massa definita dall'utente (massimo 2 Da) delle masse di frammenti sono considerati corrispondenti e sono visualizzati in grassetto nell'elenco frammenti.

Nota: lo strumento Fragment Interpretation non può essere utilizzato con i seguenti tipi di scansioni:

- Ione precursore
 - Perdita neutrale
 - Ione multiplo Q1
 - Ione multiplo Q3
 - Monitoraggio di reazioni multiple (MRM)
-

Connessione dello strumento Fragment Interpretation a uno spettro

Quando è selezionato un singolo legame non ciclico nella struttura molecolare, lo strumento Fragment Interpretation evidenzia i due frammenti creati quando il legame viene scisso, quindi vengono visualizzati i picchi corrispondenti nello spettro collegato.

Se sono visualizzati più riquadri di spettro, lo strumento Fragment Interpretation si collega allo spettro attivo. Se il file di dati contiene più di un campione, lo strumento Fragment Interpretation si collega allo spettro attivo.

Se uno spettro è aperto quando si apre lo strumento Fragment Interpretation, il riquadro attivo si collega automaticamente allo spettro aperto.

1. Fare clic su **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Dall'angolo inferiore destro del riquadro Fragment Interpretation, fare clic sul pulsante Connect.
Il puntatore passa allo strumento di collegamento.
3. Fare clic sul grafico dello spettro da collegare allo strumento Fragment Interpretation. L'indicatore di grafico collegato, nell'angolo inferiore sinistro, contiene il nome del grafico collegato allo strumento Fragment Interpretation. Il collegamento si interrompe quando il grafico o lo strumento Fragment Interpretation vengono chiusi. Se il file wiff collegato contiene più di un campione, il riquadro Fragment Interpretation si aggiorna automaticamente mano a mano che gli utenti scorrono attraverso i campioni.

Abbinamento dei frammenti ai picchi

1. Fare clic su **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un file mol nel riquadro Fragment Interpretation, selezionare nel Fragment List una cella in grassetto.
Nello spettro, il software evidenzia il picco spettrale corrispondente nel colore selezionato nella scheda Options. Nella struttura molecolare, il legame è evidenziato.
3. Se si fa clic su una riga con più di un frammento corrispondente, il picco spettrale più vicino alla sua massa monoisotopica viene evidenziato nello spettro di massa nel colore specificato nella scheda Options.

Selezione di un legame in una struttura molecolare

1. Fare clic su **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un file mol aperto nel riquadro Fragment Interpretation, fare clic su un singolo legame non ciclico nella struttura molecolare.

I due frammenti risultanti sono evidenziati nella Fragment List. Le masse dei due frammenti sono visualizzate su entrambi i lati del legame.

Se è collegato uno spettro, lo strumento Fragment Interpretation visualizza tutti i picchi corrispondenti nel grafico. Se si seleziona un frammento nell'elenco e se il frammento viene abbinato ad un picco, la finestra Fragment Interpretation ingrandisce tale picco.

Visualizzazione degli isotopi

Lo strumento Fragment Interpretation può visualizzare la distribuzione isotopica teorica di un picco corrispondente ad un frammento nella Fragment List.

1. Fare clic su **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.

2. Nel riquadro Fragment Interpretation, fare clic sulla scheda **Options**.
3. Selezionare la casella di controllo **Show Isotopes**.
4. Fare clic su **Apply**.
5. Nella Fragment List, selezionare un frammento corrispondente ad un picco.
La distribuzione isotopica dei picchi abbinati appare nello spettro.

Visualizzazione di una differenza di formula in uno spettro

È possibile visualizzare la differenza di formula e di massa monoisotopica tra due frammenti ipotetici correlati. La differenza di formula appare quando si selezionano due picchi. La differenza di formula e massa monoisotopica viene mostrata quando si selezionano due frammenti o due singoli legami non ciclici.

1. Fare clic su un picco di frammento.
2. Premere **Shift** e fare clic su un altro picco di frammento.
Se la differenza di formula è pari al frammento tratto dall'elenco frammenti, il frammento viene evidenziato nell'elenco. Altrimenti, la differenza di formula tra i frammenti corrispondenti dei picchi compare in una finestra di messaggio.

Visualizzare una differenza di formula nell'elenco frammenti

1. Fare clic sul numero di riga per un frammento.
2. Premere **Ctrl** e fare clic su un altro frammento.
La differenza di formula e massa monoisotopica viene mostrata in una finestra di messaggio se i frammenti sono correlati.

Visualizzazione di una differenza di formula in una struttura molecolare

1. Fare clic su un legame singolo non ciclico. Viene selezionato il frammento predefinito (dei due frammenti evidenziati). Per selezionare l'altro frammento del legame scisso, premere **Ctrl** e fare clic sul legame.
2. Selezionare un secondo legame non ciclico. Per selezionare il frammento di preimpostato, premere **Shift** e fare clic sul legame. Per selezionare l'altro frammento del legame scisso, premere **CtrlShift +** e fare clic sul legame.
Fragment Interpretation calcola la differenza di formula e massa monoisotopica tra il frammento selezionato nel passaggio [1](#) e il frammento selezionato nel passaggio [2](#), se i frammenti sono correlati. La differenza di formula e massa monoisotopica viene mostrata in una finestra di messaggio.

IDA Explorer

Information Dependent Acquisition (IDA) Explorer viene utilizzato per visualizzare i dati acquisiti attraverso un metodo IDA.

IDA Explorer può essere disattivato e attivato nella scheda IDA Explorer nella finestra di dialogo Appearance Options. Anche le colonne presenti nella List View possono essere definite in questa scheda.

Il lato sinistro del visualizzatore mostrato nella figura seguente mostra le masse sulle quali è stata eseguita una scansione ione prodotto. In quest'area, gli utenti possono esaminare in una visualizzazione elenco o in una visualizzazione struttura la massa, l'intensità, l'ora e l'energia di collisione degli ioni su cui sono state eseguite scansioni ione prodotto. Nella visualizzazione elenco, l'elenco può essere ordinato facendo doppio clic su qualsiasi intestazione di colonna. Utilizzare la finestra di dialogo Appearance Options per personalizzare le colonne nella visualizzazione elenco.

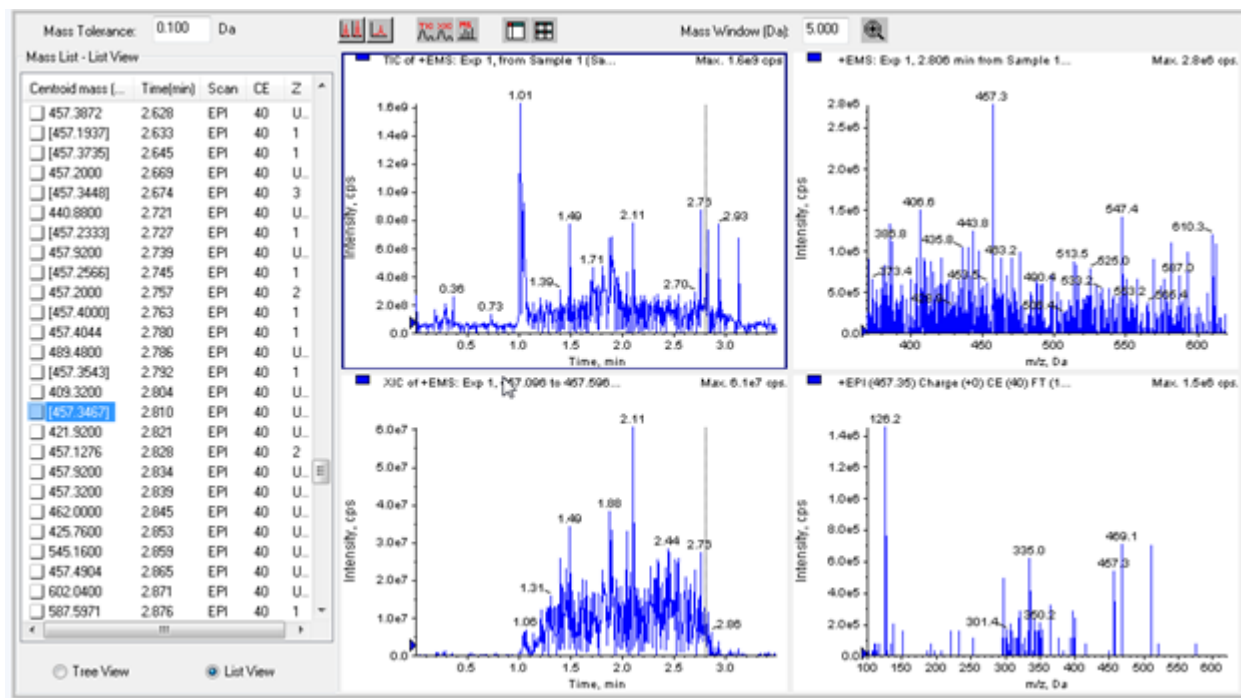
Sul lato destro, la visualizzazione è divisa in quattro riquadri. Il riquadro in alto a sinistra mostra i dati TIC dell'analisi. Il riquadro in basso a sinistra mostra l'XIC della massa. Il riquadro in alto a destra mostra l'analisi o l'analisi alternata con le scansioni Enhanced Resolution (ER) e il riquadro in basso a destra mostra la scansione prodotto.

Il visualizzatore IDA elenca tutte le masse sulle quali sono state eseguite i tipi di scansione Enhanced Product Ion (EPI) o ER. Nel visualizzatore IDA, gli utenti possono eseguire le seguenti operazioni:

- Fare clic sulla massa nella visualizzazione ad elenco o ad albero per visualizzare i plot relativi a quella massa.
- Visualizzare lo spettro di indagine dal quale è stata identificata la massa e lo spettro prodotto di quella massa.
- Mostra il TIC della scansione di indagine e l'XIC per ciascuna massa.

Nota: Le parentesi intorno ad una massa indicano che quella massa è unita. Una massa unita è continua attraverso un numero di cicli. Quando viene mostrata una massa unita, indica uno spettro medio, che contiene la media di tutti gli spettri contigui.

Figura 5-5: Visualizzatore IDA



Library Database

La funzione Library Search confronta gli spettri sconosciuti per conoscere gli spettri MS contenuti in un database libreria e genera un elenco di possibili corrispondenze. Utilizzare Library Search per creare e gestire un database di spettri di massa che può essere utilizzato per la ricerca e la corrispondenza di spettri sconosciuti rispetto agli spettri di massa memorizzati nel database.

Con Library Search, gli utenti possono:

- Confrontare i contenuti della libreria rispetto ad uno spettro sconosciuto.
- Aggiungere record alla libreria.
- Modificare record esistenti.

I dati della libreria possono essere memorizzati nelle seguenti posizioni:

- MS Access su un database locale.
- Server SQL MS.

Prima di utilizzare la funzione Library Search, determinare dove sono memorizzati i dati libreria e collegare il computer a quella posizione. I database libreria possono essere memorizzati localmente sul computer oppure su un server in una rete.

Utilizzare un alias per connettersi a un database. In questo caso, l'alias specifica un connessione a un database specifico e può includere il nome utente e la password necessarie per accedere al database. Ad esempio, un utente potrebbe avere un piccolo database libreria di composti identificati su un computer e l'organizzazione potrebbe avere

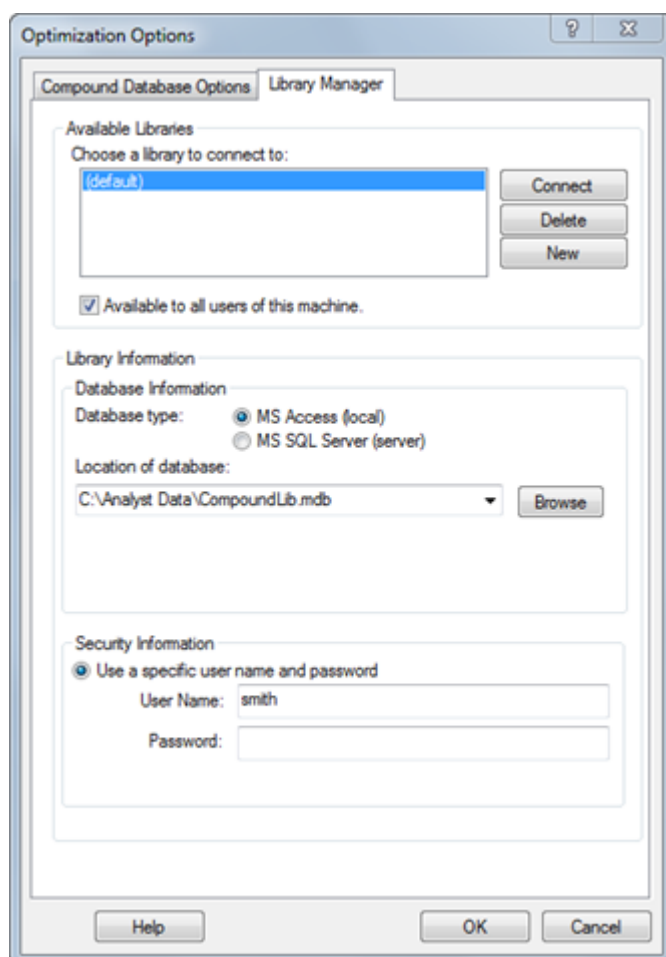
un database centrale utilizzato occasionalmente dagli utenti. Creare alias per ciascun database affinché l'utente possa passare rapidamente da un database a un altro. Per informazioni sulla creazione di alias e la connessione ai database, fare riferimento alla Guida.

Passaggio tra database di librerie esistenti

Gli utenti possono collegarsi a qualunque database con alias già impostati.

1. Fare clic su **Tools > Settings > Optimization Options**.
Si apre la finestra di dialogo Optimization Options.
2. Fare clic sulla scheda **Library Manager**.

Figura 5-6: Finestra di dialogo Optimization Options — Scheda Library Manager

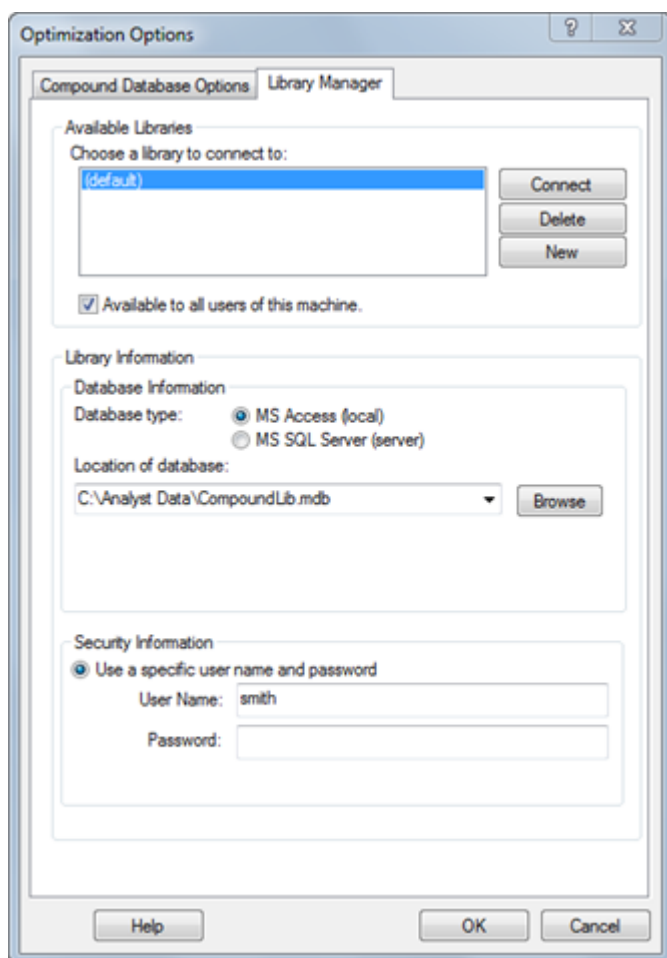


3. Nella sezione **Available Libraries**, fare clic sull'alias del database a cui collegarsi, quindi fare clic su **Connect**.
4. (Facoltativo) Per consentire ad altri utenti di accedere al database, selezionare la casella di controllo **Available to all users of this machine**.
5. Fare clic su **OK**.

Creazione di un Local Library Database

1. Fare clic su **Tools > Settings > Optimization Options**.
Si apre la finestra di dialogo Optimization Options.
2. Fare clic sulla scheda **Library Manager**.

Figura 5-7: Finestra di dialogo Optimization Options — Scheda Library Manager



3. Nella sezione **Available Libraries**, fare clic su **New**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Add Library.

Figura 5-8: Finestra di dialogo Add Library

Add Library

Library Information

Enter a Name for the Library

Database Information

Database type: ☒ MS Access (local) ☐ MS SQL Server (server)

Enter the location of the database:

Browse

Security Information

☒ Use a specific user name and password

User Name:

Password:

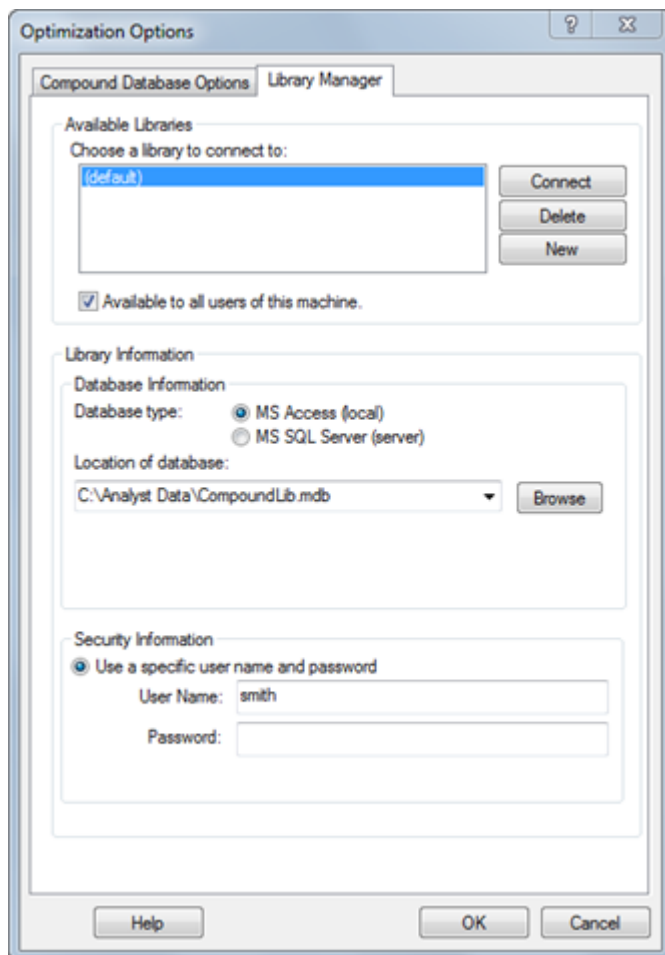
Save Cancel

4. Nel campo **Enter a Name for the Library**, digitare un nome per la libreria.
5. Nella sezione **Database Information**, selezionare **MS Access (local)**.
6. Digitare l'ubicazione del database.
7. Nella sezione **Security Information**, digitare un nome utente e una password per accedere al database, se necessario.
8. Fare clic su **Save**.

Collegamento ad un Library Database su server

1. Fare clic su **Tools > Settings > Optimization Options**.
Si apre la finestra di dialogo Optimization Options.
2. Fare clic sulla scheda **Library Manager**.

Figura 5-9: Finestra di dialogo Optimization Options — Scheda Library Manager



3. Nella sezione **Available Libraries**, fare clic su **New**.
Si apre la finestra di dialogo Add Library.
4. Nel campo **Enter a Name for the Library**, digitare un nome per la libreria.
5. Nella sezione **Database Information**, selezionare **MS SQL Server (server)**.

Figura 5-10: Finestra di dialogo Add Library

The 'Add Library' dialog box is shown with the following fields and options:

- Library Information:** A text input field labeled 'Enter a Name for the Library'.
- Database Information:**
 - Database type: Two radio buttons, 'MS Access (local)' and 'MS SQL Server (server)'. The second option is selected.
 - Enter the name of the database server: A dropdown menu with a 'Refresh' button to its right.
 - Enter the name of the database on the server: A text input field.
- Security Information:**
 - Two radio buttons: 'Use Windows integrated security' and 'Use a specific user name and password'. The second option is selected.
 - User Name: A text input field.
 - Password: A text input field.
- Buttons:** 'Save' and 'Cancel' buttons at the bottom right.

6. Digitare il nome del server del database.
7. Digitare il nome del database.
8. Compiere una delle seguenti operazioni:
 - Se sono necessari un nome utente e una password specifici per accedere a questo database, digitarli.
 - Se è utilizzata la protezione Windows, nella sezione Security Information, selezionare l'opzione **Use Windows integrated security**.
9. Fare clic su **Save**.

Visualizzazione di tutti i record libreria

Fare clic su **Explore > Library Search > List**.

Si apre la finestra di dialogo Librarian con tutti i record contenuti nel database.

Aggiunta di un record alla libreria

1. Fare clic con il pulsante destro del mouse su uno spettro attivo, quindi fare clic su **Add a Record**.
Lo spettro viene calcolato automaticamente come centroide. Viene visualizzata la finestra di dialogo Add a Record con i dati dello spettro.

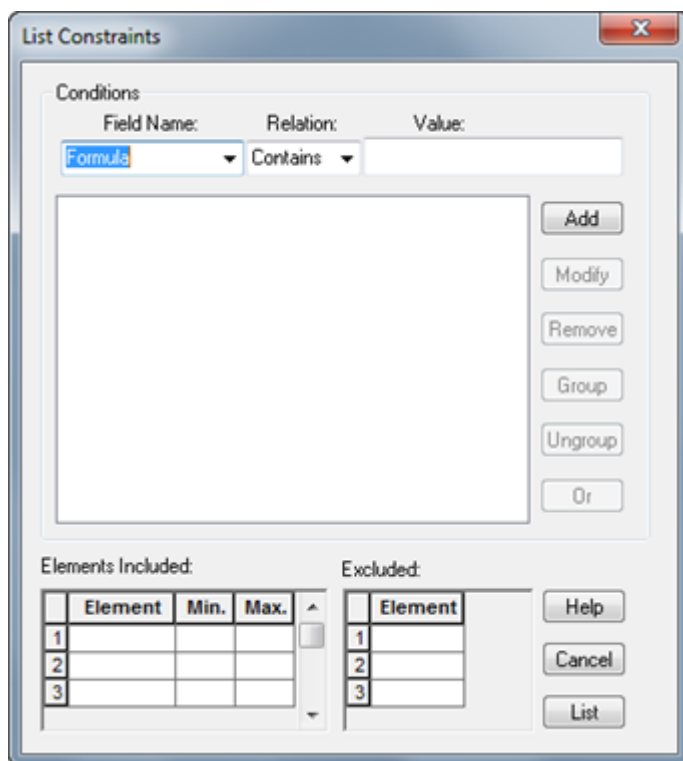
2. Nella scheda Mass Spectral Information, immettere un nome nel campo **Compound Name**.
Il nome del composto è obbligatorio e deve identificare in maniera univoca il composto all'interno della libreria.
3. Modificare qualunque altro campo. Molti campi sono compilati automaticamente con i dati associati allo spettro.
4. Fare clic sulla scheda **General Information**.
5. Modificare i campo come richiesto.
6. Fare clic su **OK**.

Ricerca dei record libreria con vincoli

Utilizzare List with Constraints per restringere i risultati. Una volta definiti, i vincoli vengono utilizzati per tutte le ricerche.

1. Fare clic su **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Figura 5-11: Finestra di dialogo List Constraints



Si apre la finestra di dialogo List Constraints.

2. Nell'elenco **Field Name**, selezionare un campo su cui basare un vincolo.
3. Nell'elenco **Relation**, selezionare la relazione (operatore) che si applica al nome del campo.
4. Nel campo **Value**, digitare il valore del nome del campo basato sulla relazione.

5. Per aggiungere il vincolo selezionato all'elenco **Conditions**, fare clic su **Add**.
6. Continuare ad aggiungere i necessari vincoli all'elenco delle condizioni.
7. Abbinando vincoli distinti nell'elenco **Conditions**, è possibile creare condizioni più specifiche che migliorano la ricerca. Per raggruppare i vincoli, selezionarli e fare clic su **Group**. Per separare i vincoli raggruppati, fare clic sul gruppo e quindi su **Ungroup**.
8. Per modificare la relazione tra vincoli, fare clic sulla relazione, quindi fare clic su **And** o **Or**.
9. Per includere i composti contenenti un certo numero di atomi di elementi specifici, selezionare o digitare gli elementi nella tabella **Elements Included**, quindi digitare un numero minimo e massimo di atomi dell'elemento.

Nota: i simboli degli elementi rispettano le maiuscole e le minuscole. Ad esempio, il simbolo dell'idrogeno è H, non h, mentre quello del sodio è Na, non NA o na.

10. Per escludere i composti contenenti determinati elementi, selezionare o digitare gli elementi nella tabella **Excluded**.
11. Per cercare composti corrispondenti ai criteri impostati, fare clic su **List**.
I record corrispondenti a tutti i vincoli vengono mostrati nella tabella **Records**. I vincoli elencati vengono salvati.

Suggerimenti per ricerche nella libreria

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Raggruppare le condizioni	Selezionare le condizioni da raggruppare e fare clic su Group . Questa funzione si comporta come le parentesi nelle formule.
Cercare senza usare vincoli	Fare clic con il pulsante destro del mouse su uno spettro attivo, quindi fare clic su Search Library . Viene visualizzata la finestra di dialogo Search Results.

Ricerca di uno spettro simile

È possibile ricercare nella libreria uno spettro e le relative informazioni sui suoi composti, che corrisponda o sia simile a uno spettro attivo. Le ricerche possono essere condotte con o senza vincoli. Quando si effettua una ricerca con vincoli, vengono elencati solo i record corrispondenti a tutti i criteri. I risultati appaiono in un elenco ordinato. Il primo elemento dell'elenco è quello che si adatta maggiormente allo spettro attivo. Le voci che seguono non corrispondono altrettanto bene.

Più vincoli si selezionano, più l'elenco sarà preciso, con un minor numero di corrispondenze pertinenti. Una volta definita una serie di vincoli, questi saranno applicati a tutte le ricerche successive, a meno che non vengano modificati. Quando si ricerca senza vincoli, si fa

Analisi qualitativa dei dati

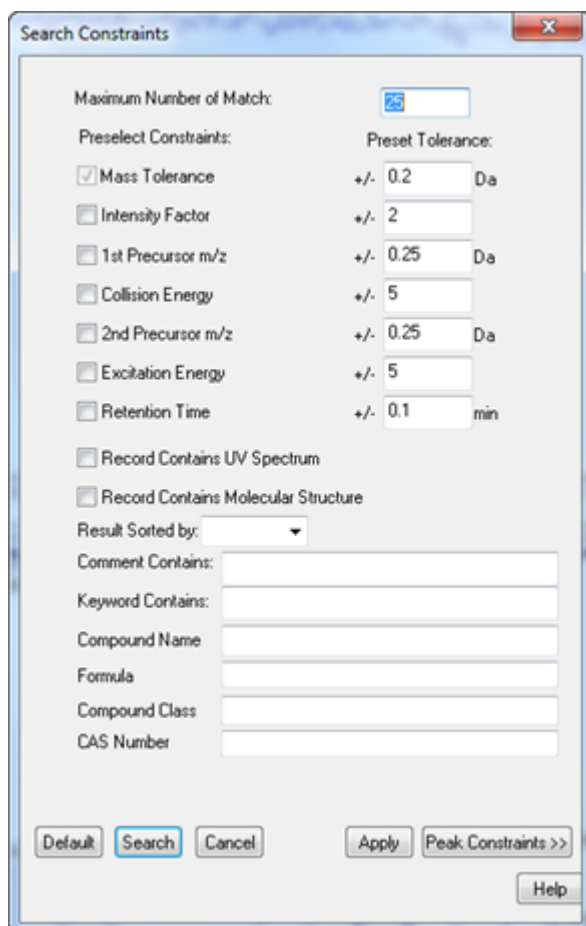
riferimento ad un elenco assai più lungo di spettri suggeriti, in quanto la libreria effettua un minor numero di corrispondenze rispetto ai dati spettrali.

Solo i picchi al di sopra della soglia sono utilizzati nella ricerca. Quando si selezionano i vincoli di ricerca, è possibile aggiungere o sottrarre picchi dallo spettro attivo.

Ad esempio, se si ritiene che un picco sia in realtà un impulso di fondo o di rumore, non usarlo per la ricerca, in quanto potrebbe produrre risultati imprecisi.

1. Fare clic con il pulsante destro del mouse su uno spettro attivo, quindi fare clic su **Search With Constraints**.
Il software calcola automaticamente il centroide di uno spettro.
2. Nel campo **Maximum Number of Match**, digitare il numero massimo di composti che si desidera vengano restituiti dalla ricerca.

Figura 5-12: Finestra di dialogo Search Constraints



3. Nella sezione **Preselect Constraints**, selezionare le caselle di controllo per i vincoli da applicare.
4. Per ogni vincolo selezionato, nella sezione **Preset Tolerance**, digitare la tolleranza.
5. Se necessario, selezionare un metodo di ordinamento record dall'elenco **Result Sorted by**.

6. Se necessario, digitare il testo nel campo **Comment Contains**.
7. Se necessario, digitare il testo nel campo **Keyword Contains**.
8. Per applicare i vincoli di picco aggiungendo e rimuovendo picchi, fare clic su **Peak Constraints**.
Viene visualizzata la tabella Peaks Included.
9. Per aggiungere picchi all'elenco di ricerca, fare clic su **Add**, quindi digitare i valori m/z e l'intensità corrispondente nella cella vuota.
10. Per eliminare picchi in modo che non vengano inclusi nella ricerca, selezionare i picchi e fare clic su **Remove**.
11. Fare clic su **Search** per salvare i vincoli e avviare la ricerca.

Visualizzare un composto dai risultati delle ricerca

Se più spettri corrispondono allo spettro sconosciuto, l'utente potrebbe desiderare di visualizzare spettri conosciuti e confrontarli con quello sconosciuto.

1. Nella finestra di dialogo Search Results, nell'elenco dei composti, selezionare il numero di riga del composto che si desidera visualizzare.
2. Fare clic sul riquadro dello spettro di uno dei composti noti.
Viene mostrato lo spettro del composto selezionato.

File di dati elaborati

L'utente può salvare i dati elaborati, come le disposizioni e le didascalie specifiche, che possono essere aperti solo in modalità Explore. Questi file contengono anche informazioni storiche e sono simili ai file di dati, tranne per il fatto che contengono solo i dati provenienti dal riquadro attivo in Explore. Questi file hanno l'estensione pdt e sono archiviati nella cartella Data del progetto corrente.

Salvataggio di un file di dati elaborati

1. Selezionare il riquadro dei dati da salvare.
2. Fare clic su **File > Save Processed Data File**.
3. Digitare un nome nel campo **File name**.
4. Fare clic su **Save**.

Apertura di un file di dati elaborati

1. In modalità Explore, fare clic su **File > Open Processed Data File**.
Si apre la finestra di dialogo Load Processed Data File.
2. Selezionare un file, quindi fare clic su **Open**.

Dati qualitativi

L'utente può visualizzare le informazioni contenute in un file di dati sotto forma di tabella o di grafico. I dati grafici sono visualizzati sotto forma di un cromatogramma o di uno spettro. I dati nella tabella sono visualizzati come punti di dati. L'utente può eseguire diverse operazioni di ordinamento sui dati.

Quando l'utente apre un file di dati, vari riquadri si aprono nelle finestre, a seconda del tipo di esperimento eseguito.

Se la casella di controllo **MCA** è selezionata in Tune Method Editor, il file di dati si aprirà con lo spettro di massa (MS). Se la casella di controllo **MCA** non è selezionata, il file di dati si aprirà con il TIC. Selezionare un intervallo e fare doppio clic sul riquadro TIC in un dato valore di tempo per mostrare l'MS per questo intervallo.

Il software memorizza i dati in file con estensioni wiff e wiff.scan. Un file di dati può contenere dati per più di un campione. Al software sono necessari sia i file wiff che wiff.scan per aprire il file di dati. Oltre ai file di dati, il software può aprire file txt. Un file txt contiene i dati relativi ad un solo campione.

Rapporto segnale-rumore

Il rapporto segnale-rumore è l'altezza del picco divisa per il rumore.

Per calcolare il rumore, il software usa la deviazione standard, utilizzando una media pari a zero, di tutti i punti di dati nel cromatogramma dalle **Background Start** alle **Background End** (entrambe mostrate nei parametri avanzati per la finestra Quantitation Method Editor and Peak Review). Queste ore vengono configurate quando viene definito un intervallo di fondo.

Se l'utente crea un metodo senza definire un nuovo intervallo di fondo, possibile se l'integrazione preimpostata viene accettata senza modifiche, il valore per **Background Start** e **Background End** viene mostrato come **N/A**. Di conseguenza, il rapporto segnale-rumore non viene calcolato e il campo corrispondente nella Results Table viene mostrato come **N/A**.

Algoritmi di smussamento

L'utente può selezionare l'algoritmo di smussamento o l'algoritmo di smussamento gaussiano come metodo di smussamento. L'operazione di smussamento comprende la sostituzione di ciascun punto di dati con la media del punto di dati prima e dopo di esso. Il set di dati smussati sostituisce il set precedente.

I dati possono essere smussati più di una volta, ma il software può annullare solo l'ultimo smussamento.

Lo smussamento non è disponibile per gli spettri a ioni multipli (MI) o MRM.

Algoritmo di smussamento

Quando si effettua lo smussamento dei dati, l'utente imposta i valori di ponderazione per tre punti di dati: il punto corrente, il punto precedente e il punto dati successivo. L'algoritmo di smussamento moltiplica i punti di dati per i valori di ponderazione assegnati, somma tali

valori e divide il totale per la somma dei valori di ponderazione dei punti. Si tratta di uno smoothing più fine rispetto all'algoritmo Gaussiano e richiede molto tempo per eseguire lo smoothing di dati con un forte rumore di fondo.

Algoritmo di smussamento gaussiano

Lo smussamento gaussiano prevede la sostituzione di ogni punto di dati con la media ponderata di un certo numero di punti di dati su entrambi i lati. La ponderazione per ogni nuovo punto di dati è calcolata in base ad una curva gaussiana. Si tratta di uno smoothing più grossolano rispetto all'algoritmo di smoothing, ma utile per eseguire lo smoothing di dati con un forte rumore di fondo.

Quando si utilizza il metodo di smussamento gaussiano, impostare due valori:

Gaussian filter width (% della distanza minima tra i punti): la larghezza utilizzata per calcolare la ponderazione dei punti adiacenti. La larghezza è descritta in termini di percentuali della distanza tra due punti della scansione, dove la larghezza preimpostata del 100% fornisce una distribuzione tanto larga quanto la distanza tra i punti di dati.

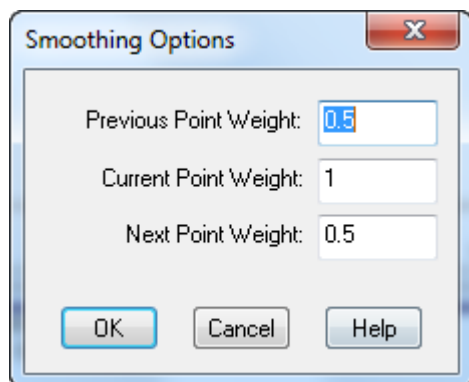
Limit of Gaussian filter (numero della distanza minima tra i punti): i limiti della curva gaussiana, mostrati in multipli della distanza tra i punti. Ad esempio, il valore preimpostato di 10 crea una curva gaussiana che si tronca dopo dieci larghezze di punti di dati su entrambi i lati del centro.

Smoothing dei dati con l'algoritmo di smoothing

Suggerimento! Per annullare lo smoothing, fare clic su **Edit > Undo**. Il software supporta un livello di annullamento.

1. Selezionare un riquadro contenente un cromatogramma o uno spettro.
2. Fare clic su **Explore > Smooth**.
Si apre la finestra di dialogo Smoothing Options.

Figura 5-13: Finestra di dialogo Smoothing Options



3. Nel campo **Previous Point Weight**, digitare il fattore di ponderazione da applicare al punto di dati precedente.

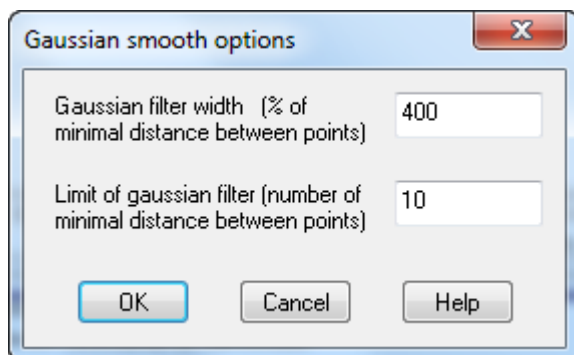
4. Nel campo **Current Point Weight**, digitare il fattore di ponderazione da applicare al punto di dati centrale.
5. Nel campo **Next Point Weight**, digitare il fattore di ponderazione da applicare al punto di dati successivo.
6. Fare clic su **OK**.
Il gruppo di dati viene smussato, sostituendo il gruppo di dati corrente nel riquadro.

Smussamento dei dati con l'algoritmo di smussamento gaussiano

Suggerimento! Per annullare lo smoothing, fare clic su **Edit > Undo**. Il software supporta un livello di annullamento.

1. Selezionare un riquadro contenente un cromatogramma o uno spettro.
2. Fare clic su **Explore > Gaussian Smooth**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Gaussian smooth options.

Figura 5-14: Finestra di dialogo Gaussian smooth options



3. Nel campo **Gaussian filter width**, digitare la larghezza utilizzata per trovare la ponderazione dei punti adiacenti, espressa in percentuale della distanza tra due punti.
4. Nel campo **Limit of gaussian filter**, immettere il limite della curva Gaussiana, espresso in multipli della distanza tra i punti.
5. Fare clic su **OK**.
Il gruppo di dati viene smussato, sostituendo il gruppo di dati corrente nel riquadro.

Log di sistema

Il registro di sistema contiene i rapporti degli eventi di sistema che includono errori, avvertenze e messaggi. Utilizzare Windows Event Viewer per visualizzare informazioni che potrebbero essere utili per la risoluzione dei problemi e l'esecuzione della diagnostica del sistema. Per utilizzare in maniera efficace le informazioni del registro di sistema, filtrare le informazioni per visualizzare solo gli elementi relativi al software.

Per comprendere le informazioni nei log di sistema risolvere gli errori, fare riferimento al Registro eventi dell'applicazione di Windows. Contiene importanti informazioni per la risoluzione dei problemi.

Salvataggio del log di sistema e inoltro al supporto

1. Fare clic su **View > Event Log**.
2. Fare clic sul segno più a destra della cartella **Windows Logs**.
3. Fare clic con il pulsante destro del mouse su **Application**.
4. Fare clic su **Save All Events As**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Save As.
5. Digitare un nome file e fare clic su **Save**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Display Information.
6. Fare clic su **Display information for these languages**.
7. Assicurarsi che **English (United States)** sia selezionato.
8. Fare clic su **OK**.
9. Allegare il file a un'e-mail e inviarlo a SCIEX.

Nota: Per funzionalità di login aggiuntive per la risoluzione dei problemi, contattare sciex.com/request-support.

Filtrare il registro di sistema in base alle informazioni correlate al software Analyst MD

1. Fare clic su **View > Event Log**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Event Viewer.
2. Fare doppio clic sulla cartella **Windows Logs**.
3. Fare clic su **Application**.
4. Fare clic su **Action > Filter Current Log**.
Viene visualizzata la finestra di dialogo Filter Current Log.
5. Selezionare **Analyst** nel campo **Event Sources**.
6. Fare clic su **OK**.
Nella finestra di dialogo Event Viewer vengono mostrati solo gli eventi del software Analyst MD filtrati.

Opzioni di calibrazione

Le opzioni di calibrazione definiscono i parametri per una curva di calibrazione, che vengono usati per determinare la concentrazione calcolata dei campioni. La curva è un grafico della concentrazione dello standard rispetto all'area o all'altezza dello standard se non viene usato alcuno standard interno. Se si utilizza uno standard interno, la curva è un grafico del rapporto di concentrazione rispetto al rapporto dell'area o dell'altezza. Questa curva viene usata, insieme all'area (o all'altezza) per gli sconosciuti, per interpolare la concentrazione calcolata.

Scegliere il tipo di regressione o l'adattamento migliore per adattare la curva ai punti e il fattore di pesatura migliore per il progetto.

Informazioni sulle curve di calibrazione

La curva di calibrazione è utilizzata per determinare la concentrazione calcolata dei campioni, inclusi i campioni QC. È una curva che risulta dalla tracciatura della concentrazione degli standard rispetto alla sua area o altezza, oppure rapporti, se viene utilizzato uno standard interno. L'area o dell'altezza di un campione è successivamente applicata a questa curva per determinare la concentrazione del campione, come mostrato nella Results Table. L'equazione di regressione generata da questa curva di calibrazione è usata per calcolare la concentrazione dei campioni sconosciuti.

Il software posiziona le concentrazioni note (o rapporti) sull'asse delle x e l'altezza o area calcolata (o rapporti) sull'asse delle y. Traccia poi i punti per tutti gli standard nel batch. Il sistema produce una curva con il miglior adattamento per quei punti attraverso la regressione e tipo di pesatura che è stato selezionato. Questa curva viene usata, insieme all'area (o all'altezza) per gli sconosciuti per interpolare la concentrazione.

Selezione del tipo di regressione migliore

Dopo aver selezionato un tipo di regressione (adattamento), l'utente non può vedere la curva di calibrazione dalla procedura guidata. Invece, utilizzare i valori predefiniti, l'esperienza o la policy aziendale per scegliere un tipo di regressione.

Dopo aver modificato l'adattamento, verificare la colonna **Accuracy** nella Results Table per le modifiche. Migliore è l'adattamento, migliore sarà la precisione delle analisi quantitative.

La curva di calibrazione traccia la concentrazione degli standard rispetto alla sua area o altezza di picco (o rapporti, se viene utilizzato uno standard interno). Quando i punti per gli standard vengono tracciati, determinare l'adattamento migliore della curva per questi punti e indicare la scelta nella finestra di dialogo Specify Calibration della procedura guidata. L'adattamento preimpostato è Linear, che presuppone che tutti gli standard cadranno su una linea retta. Selezionare tra i tipi di adattamento nella seguente tabella.

Tabella 6-1: Tipi di adattamento

Adatta	Descrizione
Lineare	La regressione lineare presuppone che tutti i punti standard cadranno su una linea retta.
Da lineare a zero	La regressione da lineare a zero presuppone che i punti standard cadranno su una linea retta e che i punti si allineeranno al punto zero sugli assi X e Y. Utilizzare questa impostazione per forzare la linea a passare attraverso il punto zero.
Quadratica	Se i punti standard non cadono su una linea retta, utilizzare la regressione quadratica per produrre un adattamento quadratico ai punti di dati.
Fattore di risposta medio	Se i punti standard non cadono su una linea retta, per fare la media dei punti, utilizzare la regressione con fattore di risposta medio per produrre una media della pendenza di ogni punto sulla curva.
Potenza	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.

Selezione del fattore di pesatura migliore

La curva di calibrazione traccia la concentrazione degli standard rispetto alla sua area o altezza di picco. Quando i punti per gli standard vengono tracciati, determinare il fattore di pesatura migliore per questi punti e indicarlo nella finestra di dialogo Specify Calibration. L'adattamento predefinito è **None**, che presuppone che tutti i punti lungo la curva abbiano la stessa importanza. Selezionare tra i tipi di pesatura nella seguente tabella. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla sezione: [Fattori di ponderazione](#).

Tabella 6-2: Tipi di pesatura

Pesatura	Descrizione
1/x	Utilizzare un fattore di pesatura pari a 1/x per dare più enfasi ai punti di valore inferiore.
1 / x ²	Utilizzare un fattore di pesatura di 1/x ² per dare molta più enfasi ai punti di valore inferiore.
1/y	Utilizzare un fattore di pesatura di 1/y quando si calibra tramite l'area (asse y) anziché tramite la concentrazione (asse x), ed è necessario dare un po' di enfasi sui punti di valore inferiore. Una pesatura di 1/y è una variante di 1/x in cui y e x devono essere proporzionali l'uno all'altro.

Tabella 6-2: Tipi di pesatura (continua)

Pesatura	Descrizione
$1 / y^2$	Utilizzare un fattore di pesatura di $1/y^2$ quando si calibra tramite l'area (asse y) anziché tramite la concentrazione (asse x), ed è necessario dare molta più enfasi ai punti di valore inferiore. Una pesatura di $1/y$ quadrato è una variante di $1/x$ quadrato in cui y e x devono essere proporzionali l'uno all'altro.
$\ln x$	Utilizzare il logaritmo di x per dare più enfasi ai punti di valore superiore.
$\ln y$	Utilizzare il logaritmo di y per dare più peso ai punti di valore superiore. Utilizzare quando si calibra tramite l'area (asse y) anziché tramite la concentrazione (asse x).

Algoritmi di integrazione

Il software Analyst MD dispone di due algoritmi di integrazione: l'algoritmo di integrazione Analyst Classic originale e l'algoritmo di integrazione IntelliQuan. L'algoritmo IntelliQuan fornisce un rilevamento picchi più coerente e una funzionalità integrata, con un minor numero di parametri che richiedono regolazioni.

Algoritmi di integrazione Analyst Classic e IntelliQuan Integration

L'algoritmo IntelliQuan utilizza uno dei due parametri di rilevazione picchi: Automatic IQA II, che è impostato senza parametri, o Specify Parameters MQ III. Dopo aver integrato i picchi utilizzando l'algoritmo IntelliQuan, scegliere quale parametro di rilevazione picchi si adatta al set di dati. Ciò viene fatto nei parametri di integrazione picchi mostrati nel riquadro o finestra Peak Review.

La seguente tabella mostra i parametri disponibili con l'algoritmo Analyst Classic.

Tabella 6-3: Algoritmo Analyst Classic

Parametro	Definizione
Default Bunching Factor	Numero di punti da ponderare insieme e considerare come singolo punto per il rilevamento del picco.
Default Number of Smooths	Il numero di volte in cui viene arrotondato il cromatogramma.
Default Void Volume Retention Time	Qualunque picco che si verifica prima di questo tempo viene ignorato.
Default Concentration Units	Le unità di concentrazione utilizzate per descrivere la concentrazione del campione, ad esempio, pg/ μ L.

Tabella 6-3: Algoritmo Analyst Classic (continua)

Parametro	Definizione
Default Calculated Concentration Units	Le unità di concentrazione utilizzate per descrivere la concentrazione del campione calcolata, ad esempio, pg/ μ L.
Default RT Window	La finestra di tempo centrata al tempo di ritenzione previsto per il rilevamento dei picchi. Ad esempio, una finestra di tempo di ritenzione di 30 secondi da ulteriori 15 secondi prima e dopo il tempo di ritenzione previsto.

La seguente tabella mostra i parametri disponibili con l'algoritmo MQ III, ma non con l'algoritmo IQA II.

Tabella 6-4: Algoritmo MQ III

Parametro	Definizione
Default Noise Percentage	La soglia utilizzata nella rilevazione dei picchi. Solo i picchi più elevati rispetto a questa percentuale specificata saranno rilevati.
Default Baseline Subtraction Window	Una finestra di tempo intorno a ciascun punto di dati viene utilizzata per determinare l'altezza della correzione della linea di base da applicare a quel punto. Questa finestra di tempo aiuta a rimuovere rumore eccessivo dal cromatogramma. La linea di base è definita come la linea che collega il punto di intensità minima sul lato sinistro di un certo punto di dati al punto di minima intensità sul lato destro, all'interno di una finestra specifica.
Default Peak-Splitting Factor	Controlla se un dato cluster di picco consiste in picchi adiacenti multipli o in un picco (probabilmente rumoroso). Se il calo di intensità è inferiore a quel valore specificato, viene riportato un singolo picco. Altrimenti, il punto con intensità minima nel calo divide il cluster in due picchi separati. Impostare un fattore ampio previene il fatto che i cluster siano divisi in più di un picco.
Default Void Volume Retention Time	Qualunque picco che si verifica prima di questo tempo viene ignorato.
Report Largest Peak	Selezionando questo parametro ritorna il tempo più grande nella finestra del tempo di ritenzione. Se questo parametro non è selezionato, viene trovato il picco più vicino al tempo di ritenzione previsto. Il tempo di ritenzione previsto viene automaticamente calcolato nel Quantitation Wizard.

La seguente tabella mostra i parametri disponibili per l'utilizzo con entrambi gli algoritmi IntelliQuan.

Tabella 6-5: Algoritmo IntelliQuan per IQA II e MQ III

Parametro	Definizione
Default Minimum Peak Height	L'altezza minima di un picco necessaria per l'integrazione dei picchi.
Default Minimum Peak Width	La larghezza minima di un picco necessaria per l'integrazione dei picchi.
Default RT Window	Specifica la finestra di tempo centrata al tempo di ritenzione previsto per il rilevamento dei picchi. Ad esempio, una finestra di tempo di ritenzione di 30 secondi da ulteriori 15 secondi prima e dopo il tempo di ritenzione previsto.
Default Smoothing Width	Il numero di punti utilizzati nello smussamento dati.
Default Concentration Units	Le unità di concentrazione utilizzate per descrivere la concentrazione del campione, ad esempio, pg/ μ L.
Default Calculated Concentration Units	Le unità di concentrazione utilizzate per descrivere la concentrazione del campione calcolata, ad esempio, pg/ μ L.

Strumenti di creazione del metodo di quantificazione

Il software mette a disposizione quattro strumenti per la creazione del metodo di quantificazione, ciascuno dei quali crea un metodo completamente funzionante. La scelta dello strumento migliore dipende dalle attività da eseguire.

Si consiglia all'utente esperto nello sviluppo dei metodi di creare o modificare metodi di acquisizione e di quantificazione.

Per ulteriori informazioni su ruoli e sicurezza, vedere la sezione: *Informazioni su utenti e ruoli* nel documento: *Guida del direttore del laboratorio*.

Procedure guidate

Le procedure guidate per la creazione di metodi disponibili sono Standard Quantitation Wizard e Automatic Quantitation Wizard. Entrambe consentono all'utente di selezionare il lotto o i lotti da quantificare, creare o selezionare un metodo di quantificazione, quindi integrare i dati campione.

La differenza tra i due consiste nel tipo di metodo creato. Standard Quantitation Wizard crea un metodo standard, mentre Automatic Quantitation Wizard crea un metodo e genera automaticamente una Results Table. Con Automatic Quantitation Wizard, i picchi non

vengono verificati come parte della creazione del metodo. Tuttavia, i picchi possono ancora essere verificati dopo l'integrazione.

Esiste solo un'occasione comune per cui non occorre verificare i picchi: quando la quantificazione viene seguita semplicemente per integrare e non per trovare i picchi. Questo potrebbe essere necessario, ad esempio, per un lotto che contiene diversi composti in ogni campione o quando la massa non è la stessa da un campione a un altro. In questi casi, utilizzare la procedura guidata automatica. In caso contrario, per eseguire la quantificazione, usare Standard Quantitation Wizard.

Usare Standard Quantitation Wizard dopo l'acquisizione del campione per eseguire le seguenti operazioni:

- Scegliere un campione rappresentativo.
- Selezionare i picchi dell'analita e dello standard interno.
- Regolare i parametri di rilevazione picchi e di integrazione.
- Revisionare i picchi durante la creazione del metodo.
- Selezionare la calibrazione.

Usare Automatic Quantitation Wizard per selezionare un lotto, creare un metodo (senza conferma di picco), quindi integrare i dati campione. Questa procedura guidata è più veloce di Standard Quantitation Wizard e non richiede che le masse sottoposte a scansione siano le stesse per tutti i campioni. Tuttavia, non consente di selezionare uno standard interno; tutti gli ioni sono trattati come analiti.

Usare Automatic Quantitation Wizard dopo l'acquisizione del campione nei seguenti scenari:

- Si desidera di selezionare la calibrazione.
- Non si desidera regolare i parametri di rilevazione picchi e di integrazione.
- Non si desidera selezionare i nomi di picco analita.
- Non si desidera avere alcuno standard interno.
- Non si desidera verificare i picchi durante la creazione del metodo o avere diversi composti in ciascun campione.

Quando i picchi vengono solo integrati, non devono essere verificati poiché non occorre calcolare la concentrazione. In questo caso, usare Automatic Quantitation Wizard, che consente di verificare i picchi dopo l'integrazione.

Rilevamento dei picchi tramite metodo automatico

Il software utilizza il processo di rilevamento picchi standard, con le seguenti eccezioni:

- Utilizza il fattore di raggruppamento e il numero di arrotondamenti (dal wizard) così come sono.
- Calcola il tempo di ritenzione previsto e le soglie di rumore e area separatamente per ciascun picco.

Quantitation Method Editor

Usare questa opzione dopo aver acquisito il campione per eseguire quanto segue:

- Regolare i parametri di rilevazione picchi e di integrazione.
- Selezionare i picchi dell'analita e dello standard interno.
- Selezionare la calibrazione.

Usare il Quantitation Method Editor per eseguire altre tre attività:

- Sommare gli ioni per l'integrazione.
- Usare uno standard interno di un altro periodo o esperimento (se lo standard interno è stato acquisito in un altro periodo o esperimento rispetto all'analita).
- Modificare un metodo esistente.

Quantitation Method Editor semiautomatico

Il Quantitation Method Editor semiautomatico fa parte del Batch Editor. Usare il Quantitation Method Editor semiautomatico per selezionare le informazioni di quantificazione, come il tipo di campione e la concentrazione del campione, prima dell'acquisizione dei dati. Questa preparazione facilita l'esecuzione delle analisi quantitative successive. In alternativa, è possibile selezionare un metodo completo nel Batch Editor, che viene quindi applicato automaticamente al termine dell'esecuzione del batch per generare la Results Table di quantificazione.

Se la funzione Quick Quant è impiegata per archiviare i tipi e le concentrazioni dei campioni nei file di dati, non utilizzare il metodo Quick Quant auto-generato per eseguire la quantificazione. Questo metodo di quantificazione non utilizza i parametri di integrazione specifici per i composti e i campioni che sono stati ottimizzati per la selezione dei picchi.

Usare questa opzione nei seguenti scenari:

- Non sono ancora stati acquisiti i campioni usando lo stesso metodo di acquisizione.
- Si desidera selezionare i nomi e le masse per i picchi dell'analita e dello standard interno.
- Si desidera selezionare le concentrazioni e i tipi di campione nella scheda Quantitation del Batch Editor, ma non si ha alcun metodo di quantificazione.
- Si desidera modificare il metodo di quantificazione, se necessario, in un secondo tempo.

Rilevamento dei picchi tramite metodo semiautomatico

Il software utilizza il processo di rilevamento picchi standard, con le seguenti eccezioni:

- Utilizza il fattore di raggruppamento (dalla finestra di dialogo Quantitation Method Options) e il numero di arrotondamenti (dalla finestra di dialogo Create Semi-Automatic Quantitation Method) così come sono.
- Utilizza lo standard più concentrato come campione rappresentativo. Per stabilire un tempo di ritenzione, utilizza il picco più ampio all'interno di tale cromatogramma.

- Per impostare le soglie di rumore e area, utilizza il rumore della linea di base risultante. (Questo processo è lo stesso della procedura di impostazione dei valori predefiniti per i picchi nei metodi normali.) Questi parametri di integrazione sono applicati a tutti gli altri campioni.
- Se il batch che viene esaminato non contiene le informazioni di quantificazione (tipo di campione e concentrazioni), il tempo di ritenzione e le soglie vengono calcolati separatamente per ciascun picco (come per i metodi completamente automatici).

Metric plot

Un metric plot visualizza graficamente i dati in una colonna della Results Table, tracciati rispetto all'asse X o Y oppure i dati di due colonne tracciati gli uni rispetto agli altri. Questa sezione descrive come generare e lavorare con i metric plot.

Sono inclusi anche alcuni metric plot predefiniti.

- Int_Std_Response (per localizzare il campione che pone problemi)
- Analyte_Area versus Height (per verificare il comportamento cromatografico)
- PK profile (conc. rispetto al punto tempo, da eseguire dopo la query Sample)

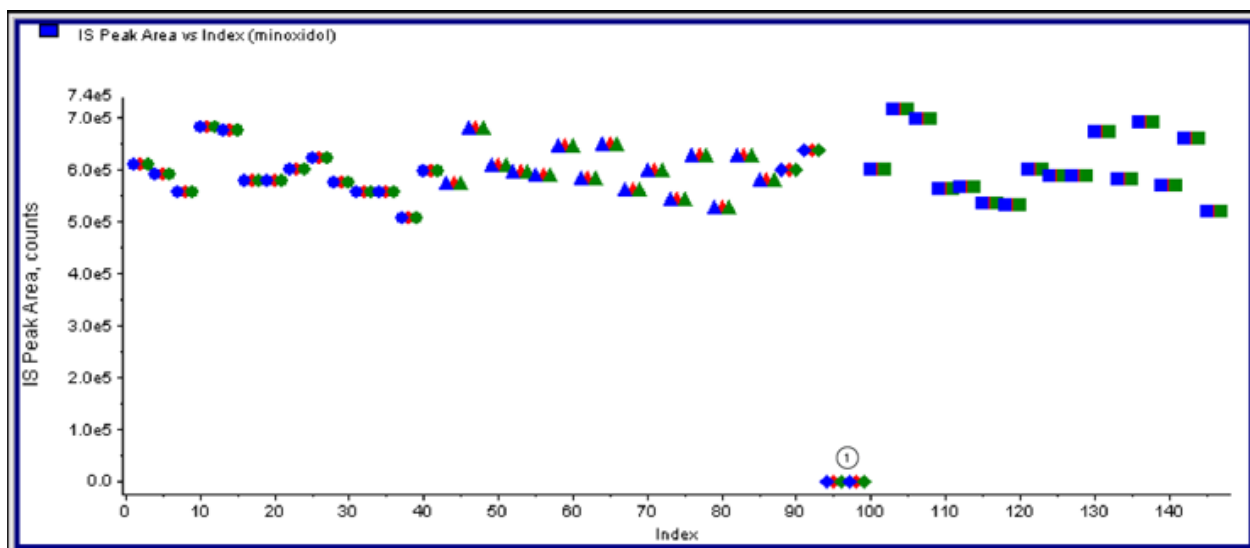
Utilizzare i metric plot per tracciare una determinata colonna, ad esempio **Analyte Peak Area**, **Accuracy** o **Calculated Concentration**, dalla Results Table. È inoltre possibile tracciare due campi della Results Table, l'uno rispetto all'altro. È quindi possibile studiare i punti che non rientrano nel range normale. I metric plot sono spesso utilizzati con le query. Per ulteriori informazioni sulle query, fare riferimento al documento: *Guida*.

Generare i metric plot nei modi seguenti:

- Utilizzare il pulsante **Plot** per tracciare una o più colonne della Results Table corrente, senza salvare i criteri di plotting.
- Creare un plot specifico per la tabella per salvare i criteri di plotting insieme alla tabella corrente.
- Creare un plot globale per salvare i criteri di plotting da utilizzare con Results Table future.

QC, sconosciuti, vuoti, doppi vuoti e solventi non sono visibili sulla curva di calibrazione, ma è possibile usarli per generare metric plot.

Figura 6-1: Esempio di metric plot per l'area di picco standard interno tracciata rispetto all'indice campione



Elemento	Descrizione
1	Vuoti doppi

Generazione di un Metric Temporary Plot

- Con una Results Table aperta, compiere una delle seguenti operazioni:
 - Per tracciare i dati sull'asse Y con l'asse X come indice, fare clic sull'intestazione della colonna dei dati da tracciare.
 - Per tracciare i dati dalla prima colonna selezionata sull'asse X e dalla seconda colonna selezionata sull'asse Y, selezionare due colonne premendo il tasto Ctrl mentre si fa clic sulle intestazioni colonna.
- Sopra la Results Table, fare clic sull'icona **Metric Plot by Selection**. Si apre il Metric Plot.
- Fare clic con il pulsante destro nel riquadro del tracciato, quindi fare clic su Data Legend per visualizzare una spiegazione dei colori utilizzati dal tracciato.
- Fare clic con il pulsante destro nel riquadro del tracciato, quindi fare clic su Point Legend per visualizzare una spiegazione dei simboli utilizzati dal tracciato.

Generazione di un metric plot e salvataggio dei criteri di plotting

- Aprire una Results Table appropriata.
- Fare clic con il pulsante destro del mouse nella Results Table, quindi fare clic su **Metric Plot > New**.

Figura 6-2: Finestra di dialogo Metric Plot

Metric Plot

Name:

X Axis

Group:

Column:

Y Axis

Group:

Column:

Show

Regression: Weighting:

☒ None

☐ Percent Deviation Percent:

☐ Standard Deviation Multiplier:

Save/Execute Cancel Execute Help

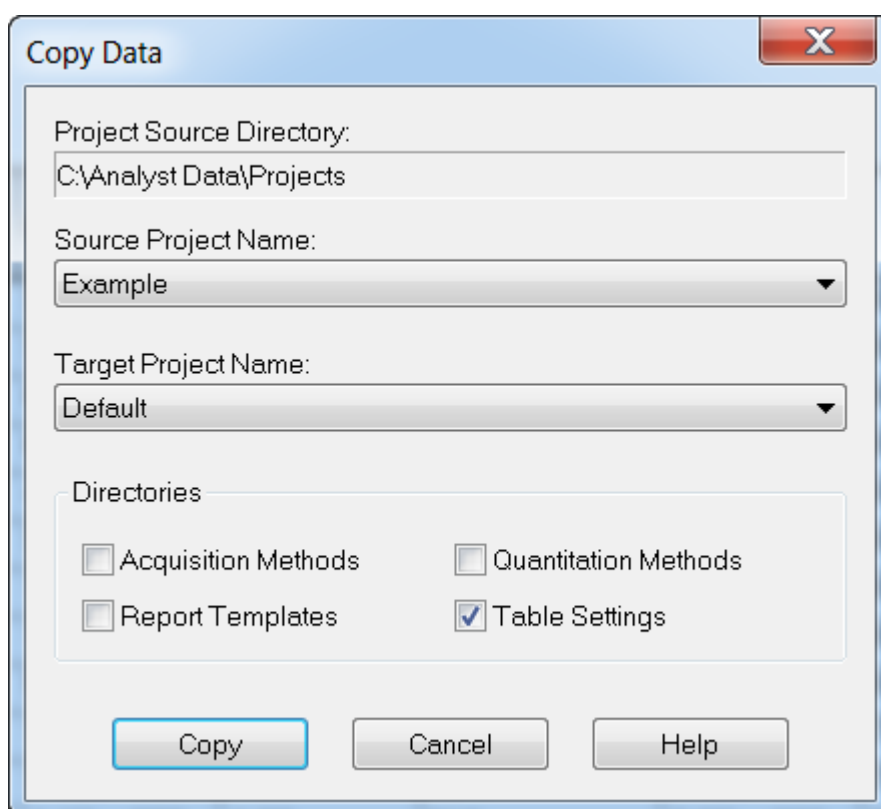
3. Nel campo **Name**, digitare il nome per i nuovi criteri di plotting.
4. Nel gruppo X-Axis, nell'elenco **Group**, selezionare **Index**, quindi lasciare vuoto l'elenco **Column** per tracciare un campo nell'asse Y utilizzando l'asse X come un indice.
5. Se necessario, nel gruppo Y-axis, nell'elenco **Group**, selezionare **Internal Standard**, quindi, nell'elenco **Column**, selezionare **IS Peak Area** per tracciare due colonne, l'una rispetto all'altra.
6. Se necessario, nell'elenco **Regression**, selezionare il tipo di regressione da utilizzare, quindi selezionare le impostazioni di regressione opportune.
7. Per generare il plot e salvare i criteri di plotting, fare clic su **Save/Execute**. Viene visualizzato il Metric Plot. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla figura: [Figura 6-1](#).
8. Fare clic con il pulsante destro nel riquadro del plot, quindi fare clic su **Data Legend** per visualizzare una spiegazione dei colori utilizzati dal plot.
9. Fare clic con il pulsante destro nel riquadro del plot, quindi fare clic su **Point Legend** per visualizzare una spiegazione dei simboli utilizzati dal plot. Questa serie di criteri è ora disponibile per futuri plot di questa Results Table. Fare clic con il pulsante destro del mouse nella Results Table per accedere ai criteri. È possibile modificare anche i criteri di plotting.

10. Per visualizzare il campione all'origine del problema, cercare di tracciare la concentrazione dello sconosciuto rispetto al tempo oppure tracciare l'area dello standard interno rispetto all'indice.

Salvataggio dei criteri di plotting di default per future Tabelle dei risultati

1. Fare clic con il pulsante destro nella Tabella dei risultati, quindi fare clic su **Table Settings > Export To New Table Settings**. Questa operazione esporterà le impostazioni tabella dal file rdb, affinché possano essere utilizzate in altri cicli di quantificazione all'interno del progetto.
2. Per esportare le impostazioni tabella ad un altro progetto, fare clic su **Tools > Project > Copy Data**.

Figura 6-3: Finestra di dialogo Copy Data



Parametri Noise e Area Threshold

Per identificare i picchi, il software necessita di un set di parametri di soglia area e rumore. Il software imposta inizialmente questi parametri, ma l'utente può successivamente modificarli. Il software imposta i parametri nel modo seguente:

1. Il software calcola la differenza di intensità maggiore tra due punti di dati sequenziali qualsiasi. Questo numero rappresenta la differenza tra due intensità, non l'intensità effettiva.

2. Per ciascuna coppia sequenziale con una differenza di intensità minore del 5% del valore calcolato nella fase 1, calcola la deviazione standard (utilizzando una media pari a zero) delle differenze di intensità. Il software non usa queste coppie di punti con una differenza di intensità maggiore del 5% del valore massimo.
 - La soglia di rumore è uguale alla deviazione standard calcolata nel passaggio 2.
 - La soglia di area è pari a cinque volte la soglia di rumore.

Nota: Il valore minimo delle soglie di rumore e di area è 0,000001. Se il calcolo precedente da un valore inferiore a questo valore minimo, il software ripristina il valore di quella soglia a 0,000001.

Ricalcolo della soglia di area e di rumore

Se viene definita una nuova area di fondo, il software ricalcola le soglie di area e di rumore nel modo seguente.

Per ciascuna coppia sequenziale di punti di dati, il software calcola la deviazione standard utilizzando una media pari a zero delle differenze di intensità. Il software Analyst MD utilizza tutti i punti nel range selezionato perché è stato esplicitamente stabilito che l'area selezionata è rumore di fondo.

- La soglia di rumore è uguale alla deviazione standard calcolata dall'intervallo selezionato.
- La soglia di area è pari a cinque volte la soglia di rumore.

Nota: Il valore minimo delle soglie di rumore e di area è 0,000001. Se il calcolo precedente da un valore inferiore a questo valore minimo, il software ripristina il valore di quella soglia a 0,000001.

Integrazione picco

Quelli che seguono, sono tipi di integrazione con cui è stata rilevata e integrata la linea di base quando è stato rilevato il picco.

- **Manual:** il picco è stato integrato manualmente dall'utente.
- **Automatic:** il picco è stato integrato automaticamente nel modo seguente:
 - **Baseline-to-baseline:** l'area del picco è definita dalle linee di discesa verticali all'inizio e alla fine del picco che si estende alla linea di base. Questo tipo di integrazione è possibile solo per i picchi che non hanno un altro picco immediatamente precedente o seguente.
 - **Valley:** simile a baseline-to-baseline, salvo che si applica solo ai picchi che hanno un altro picco immediatamente precedente o seguente.
 - **Exponential Skim:** l'area del picco è il picco principale o primario in uno scorrimento esponenziale.
 - **Exponential Child:** l'area del picco è il picco secondario che genera uno scorrimento esponenziale.

Peak Review

Durante la verifica dei picchi gli utenti possono passare in rassegna i picchi selezionati dal software, per poi ridefinire i picchi o i punti di inizio e fine ove richiesto.

In generale, il software è in grado di identificare con precisione i picchi dell'analisi e dello standard interno. Per vari motivi, fra cui l'acquisizione campioni e la definizione del metodo di quantificazione, talvolta il software perde il picco corretto, sceglie quello sbagliato o non riesce a individuare alcun picco. Altre volte, sebbene il software possa identificare correttamente il picco, gli utenti potrebbero non accettare i punti di avvio o fine selezionati.

Suggerimenti per la revisione dei picchi

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Integrazione picchi: verificare i picchi	<p>Per verificare tutti i picchi, assicurarsi che tutti i campioni siano elencati nella Results Table.</p> <p>La finestra Peak Review contiene i picchi elencati nella Results Table. Se alcuni campioni sono nascosti nella tabella (ad esempio, se viene applicata una query), lo saranno anche nella revisione picchi.</p>
Peak Integration: spostarsi al primo picco del lotto	<p>Fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro Peak Review, quindi fare clic su Show First Page. Per spostarsi all'ultimo picco del lotto, fare clic con il pulsante destro del mouse in un punto qualsiasi del riquadro Peak Review, quindi fare clic su Show Last Page.</p>

Rilevamento dei picchi

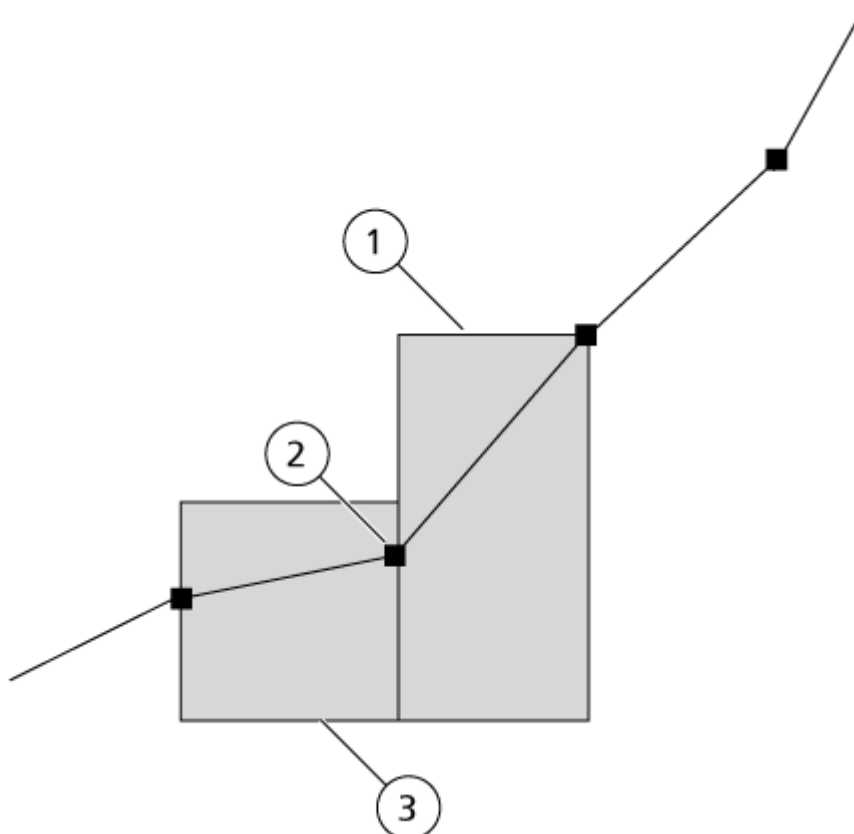
Il software rileva i picchi in quattro stadi.

1. Trova l'avvio potenziale del picco esaminando la distanza tra ciascun punto raggruppato e il precedente. Quando la distanza supera la soglia di rumore corrente, è stato trovato il potenziale avvio del picco.
2. Conferma l'avvio del picco verificando l'esistenza di punti sufficienti in una riga per il superamento della soglia dell'area.
3. Trova la sommità del picco cercando un punto più basso del punto precedente.
4. Trova il termine del picco identificando la posizione in cui la distanza tra un punto raggruppato e il successivo scende sotto la soglia di rumore. Se necessario, separa i picchi.

Rilevamento avvio potenziale picco

Per trovare l'avvio potenziale di un picco, il software misura la differenza di intensità tra coppie sequenziali di punti raggruppati, partendo dal primo punto. Quando rileva una differenza che supera l'attuale soglia di rumore, il software definisce il primo punto come l'avvio potenziale di un picco.

Figura 6-4: Rilevamento avvio potenziale picco



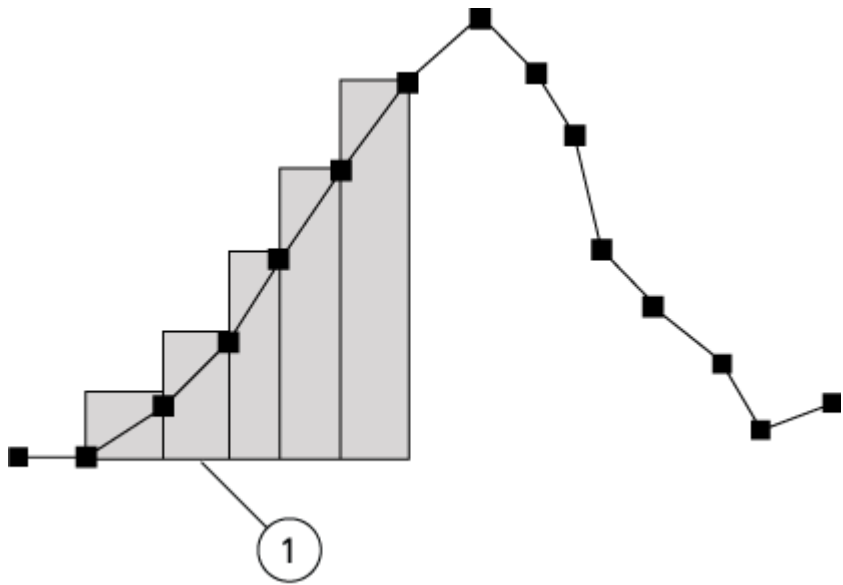
Elemento	Descrizione
1	Supera la soglia del rumore
2	Avvio potenziale del picco
3	Non supera la soglia del rumore

Conferma dell'avvio del picco

Per verificare di aver rilevato un picco reale, il software si sposta lungo la curva, aggiungendo la differenza tra l'intensità di ciascun punto di dati raggruppati e l'intensità all'avvio potenziale del picco per calcolare una somma totale. Questo processo termina quando la differenza di intensità tra punti successivi è meno della soglia di rumore. La somma è un'approssimazione dell'area dell'estremità iniziale di un picco. Se questa somma supera la soglia di area, il software conferma l'avvio del picco.

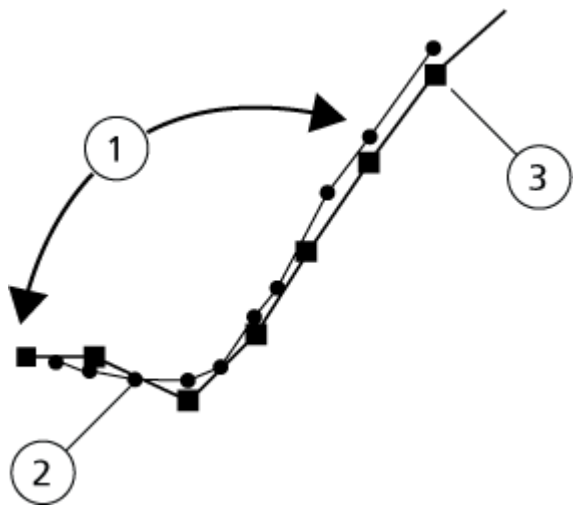
Dopodiché, il software determina l'avvio effettivo del picco muovendosi a ritroso dall'avvio potenziale del picco fino a trovare il punto più basso nel picco. Proceda a ritroso attraverso cinque raggruppamenti di dati grezzi. Questo punto è l'avvio effettivo del picco.

Figura 6-5: Conferma dell'avvio del picco



Elemento	Descrizione
1	Somma delle porzioni di area maggiore della soglia area

Figura 6-6: Conferma dell'avvio del picco



Elemento	Descrizione
1	Verifica dei punti di dati in questa regione
2	Punto dati minimo

Elemento	Descrizione
3	Avvio potenziale del picco

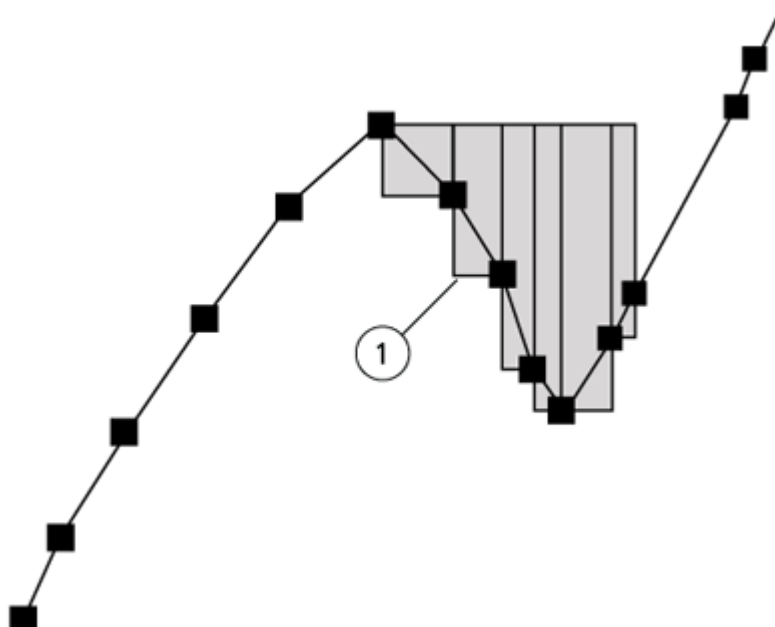
Rilevamento della sommità del picco

Per rilevare la sommità del picco, il software cerca prima un punto più basso del punto precedente. Dopodiché, per confermare che ha rilevato correttamente la sommità, somma le intensità differenti tra il picco potenziale e i punti raggruppati successivamente fino a raggiungere la fine del picco. Se la distanza totale tra i punti è maggiore di due terzi della soglia di area, la sommità del picco è confermata. Questo significa che il software si assicura che abbia un picco, quindi lavora a ritroso per trovare la sommità.

Se, tuttavia, il software trova un punto raggruppato più alto prima che l'area di test sia stata confermata, identifica una nuova sommità e riavvia l'area di test.

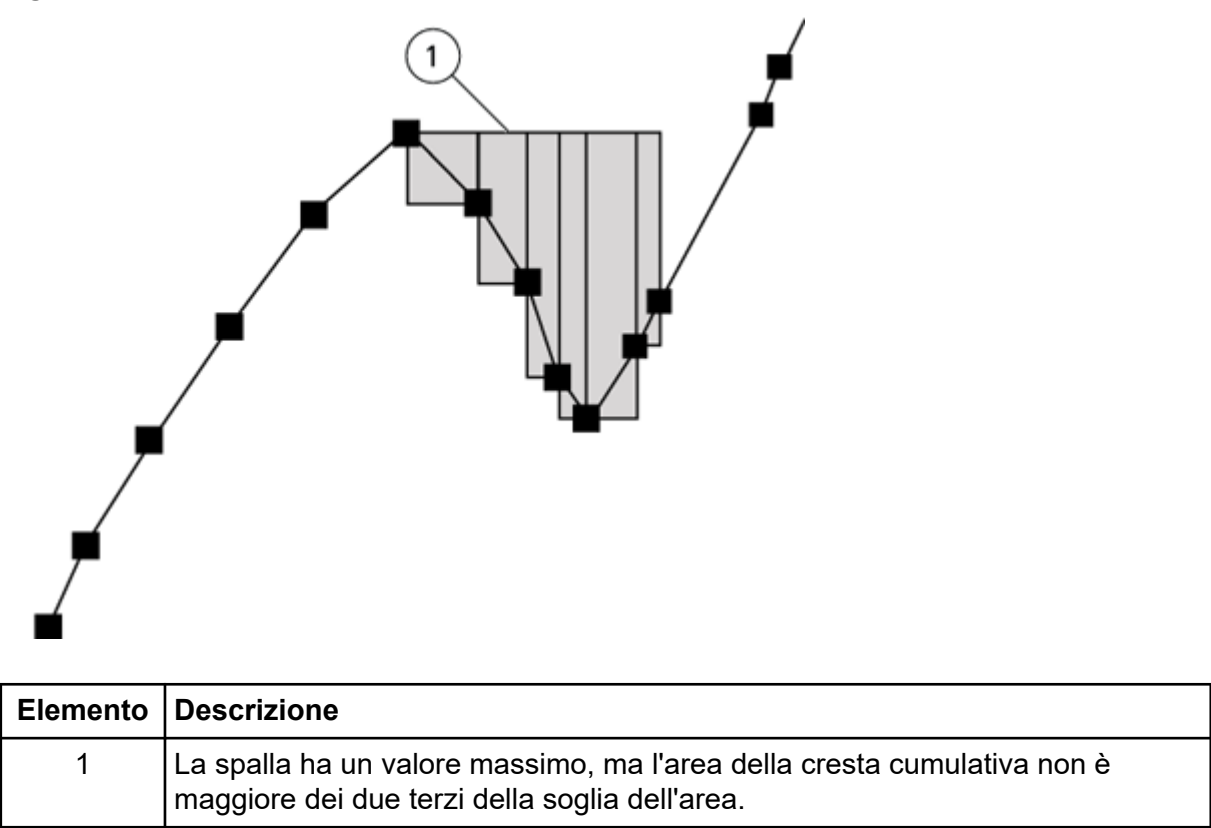
Nota: Il tempo di ritenzione corrente per un picco non è semplicemente il punto identificato come descritto in precedenza. Invece, viene determinato da una regressione quadratica in base ai tre punti di dati più alti.

Figura 6-7: Rilevamento della sommità del picco



Elemento	Descrizione
1	La somma delle porzioni di area è maggiore dei due terzi della soglia dell'area

Figura 6-8: Identificazione di una nuova sommità picco



Rilevamento della fine del picco

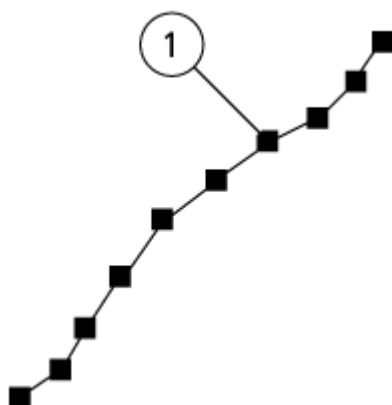
Il software definisce un punto di fine picco quando si verifica una delle seguenti condizioni:

- La differenza tra due punti consecutivi non supera il test della soglia di rumore.
- Il software rileva l'inizio di un nuovo picco.

In ogni caso, il punto raggruppato più basso degli ultimi cinque raggruppamenti viene considerato il punto di fine effettiva del picco.

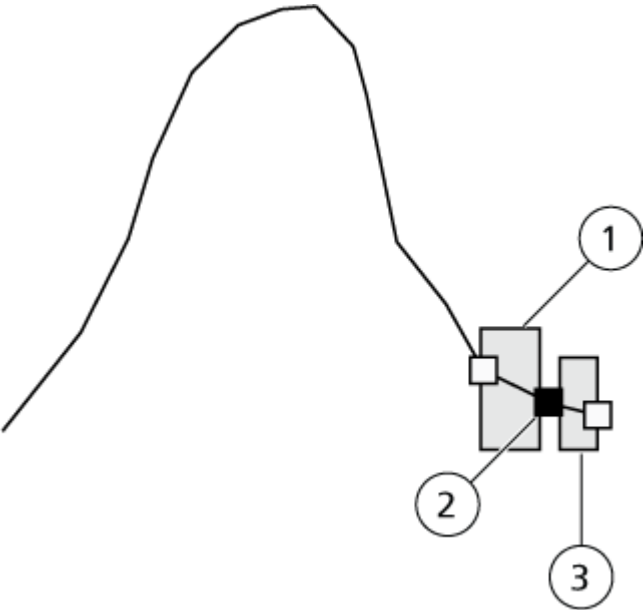
Il software trova in genere diversi picchi per ogni cromatogramma. Il picco che seleziona è quello il cui tempo di ritenzione è quello più vicino al tempo di ritenzione previsto, specificato nel metodo. Se nessun picco ha un tempo di ritenzione all'interno delle specifiche, il software contrassegna il picco come non trovato.

Figura 6-9: Rilevamento dei picchi



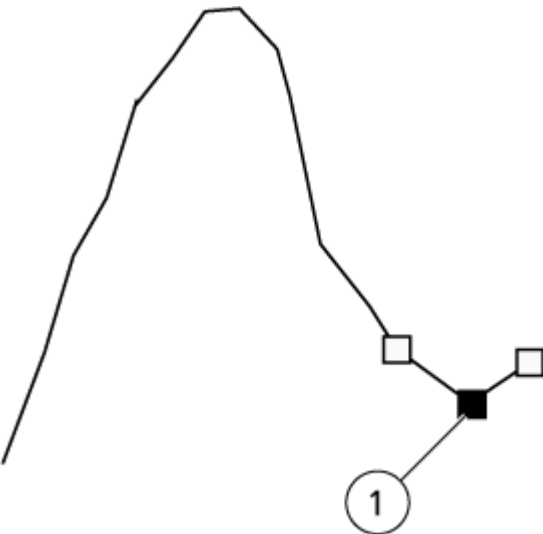
Elemento	Descrizione
1	La spalla non ha un punto massimo separato

Figura 6-10: Rilevamento della fine del picco: caso 1



Elemento	Descrizione
1	Supera la soglia del rumore
2	Fine del picco
3	Non supera la soglia del rumore

Figura 6-11: Rilevamento della fine del picco: caso 2



Elemento	Descrizione
1	Fine del picco

Picchi separati

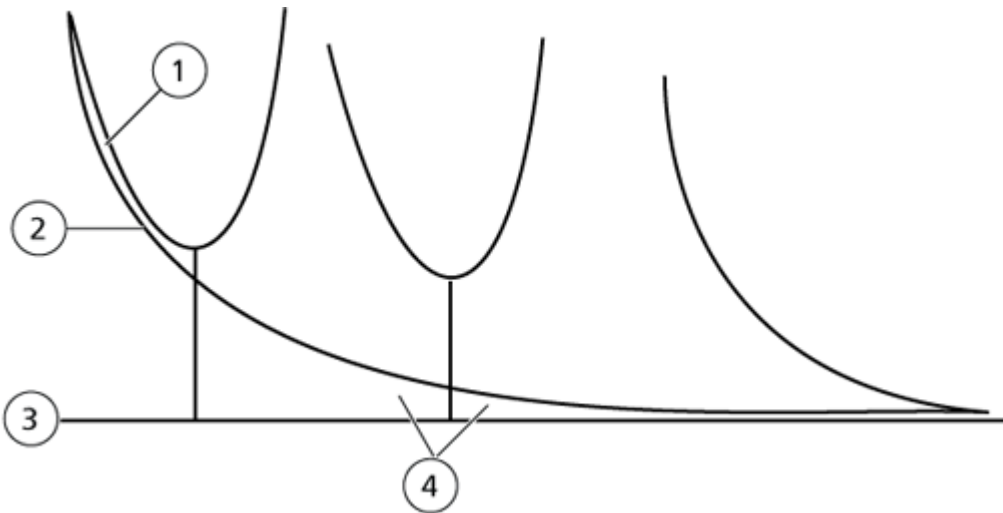
Se il nuovo picco inizia prima che il picco attuale colpisca la linea di base, il software decide, sulla base dei seguenti criteri, se risolvere la linea di base utilizzando uno scorrimento esponenziale. Lo scorrimento passa sotto uno o più picchi che seguono il precursore. Questi picchi sono chiamati picchi prodotto.

Quando il software esegue uno scorrimento esponenziale, sottrae l'area sotto lo scorrimento dai picchi prodotto e l'assegna al picco precursore. Sottrae poi la piccola area sopra lo scorrimento dal picco precursore e l'aggiunge al primo picco prodotto.

Il software utilizza i seguenti criteri per determinare se utilizzerà lo scorrimento esponenziale:

- Rapporto picco esponenziale
- Rapporto con correzione esponenziale
- Rapporto valle esponenziale

Figura 6-12: Picchi separati: uno scorrimento esponenziale



Elemento	Descrizione
1	Questa area viene sottratta dal picco precursore e aggiunta al primo picco prodotto.
2	Scorrimento esponenziale
3	Linea di base cluster
4	Queste aree vengono sottratte dai picchi prodotto e aggiunte ai picchi precursore

Query

La query è un metodo per selezionare solo i record che soddisfano determinati criteri. Gli utenti possono usare le query per visualizzare determinate parti dei dati nella Results Table corrispondente, in base alle selezioni testuali o matematiche. Una query salvata in un progetto è disponibile per tutte le Results Table all'interno di tale progetto.

Quando si utilizza una query, la tabella mostra solo le righe di dati che soddisfano i criteri selezionati. Tutte le colonne sono visualizzate. Le selezioni possono essere precisate ulteriormente eseguendo una seconda query sulle righe mostrate dalla prima query.

Usare le scelte predefinite e le voci digitate per creare una query che possa essere eseguita, salvata o modificata. Ogni linea della query funziona come una ricerca booleana che viene eseguita rispetto alle colonne della Results Table per determinare quali record mostrare. Ogni linea della query seleziona solamente i record per display che soddisfano i suoi criteri. È possibile definire una query preimpostata o specifica della tabella.

Si consiglia all'utente di convalidare tutte le query usate per analizzare i dati in una Results Table.

Query sul tipo di campione

Per una query progettata per selezionare solo il tipo di campione standard, la Results Table mostra solo le righe di dati che contengono Standard nella colonna Sample Type.

Query predefinite e query specifiche per tabella

Una query predefinita è generalmente utilizzata per identificare campioni che non soddisfano determinati criteri. Una query specifica per tabella è generalmente utilizzata per identificare record che soddisfano determinati criteri.

La query predefinita è generalmente utilizzata per rilevare problemi con controllo qualità o standard. Se la concentrazione e la variazione massima dei QC e degli standard sono selezionate nel Quantitation Method Wizard, la Results Table mostra solo quei campioni che rimangono al di fuori di questo intervallo. Se la Results Table non mostra niente, i campioni vanno tutti bene. Se la casella di controllo Execute Query as Standard Query è stata selezionata, tutti i campioni nella Results Table vengono mostrati, ma nella colonna Standard Query Status viene mostrato uno stato Fail o Pass, a seconda se il campione ha superato o no la query.

Le query specifiche per tabella vanno contro una Results Table visualizzata per selezionare record che soddisfano determinati criteri. Realizzare queste query attraverso il menu disponibile facendo clic con il pulsante destro nella tabella. Salvare ed esportare una query per renderla disponibile per Results Table future.

Specifiche per tabella o impostazioni globali

Quando si lavora con le opzioni di impostazione della tabella, le procedure possono essere specifiche per tabella o globali.

- **Table-specific settings:** quando le impostazioni della tabella sono modificate sulla tabella stessa, le modifiche alle impostazioni sono disponibili solo per quella tabella. Tuttavia, possono essere esportate come impostazioni globali.
- **Global settings:** modificare le impostazioni globali coinvolge la modifica di un gruppo di impostazioni che possono essere applicate a Results Table future. Per personalizzare una Results Table che è stata creata, scegliere un gruppo di impostazioni dalla pagina Create Quantitation Set: Select Settings & Query. Se un gruppo di impostazioni non è selezionato, il software utilizza automaticamente le impostazioni predefinite.

Come le variazioni di precisione alterano i risultati

Per le query predefinite, la precisione viene espressa come percentuale e implementata come più o meno quel numero. Ad esempio, se si digita 10 per **Maximum Variation for standards** nella finestra di dialogo Create Default Query, nella Results Table vengono visualizzati tutti i record contenenti standard la cui precisione esce dal 90% e dal 110%. Se si digita 5, nella Results Table verranno visualizzati solo gli standard la cui precisione è inferiore al 95% e superiore al 105%. Fare riferimento alla sezione: [Results Table](#).

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 6-6: 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

Opzioni di adattamento

L'adattamento indica il tipo di analisi di regressione da applicare ai dati. I vari tipi di opzione di adattamento sono linear, linear through zero, mean response factor, power e quadratic.

Regressione lineare

La regressione lineare presuppone che tutti i punti standard cadranno su una linea retta.

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

La regressione lineare attraverso lo zero presume che i punti dello standard si trovino su una linea retta e che i punti si allineino con il punto zero sugli assi x e y. Utilizzare questa impostazione per forzare la linea a passare attraverso il punto 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.

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.

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:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

Fattori di ponderazione

La seguente tabella mostra come il fattore di ponderazione (w) è calcolato per ciascuno dei sette tipi di ponderazione.

Tabella 6-7: Fattori 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, $w = 1 / y^2$.
$\ln(x)$	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) $.

Modelli di rapporti

Questa sezione descrive i vari elementi usati nei modelli di report creati usando **Report Template Editor** nella sezione **Configure** sulla barra di navigazione nel software Analyst MD.

È possibile aggiungere le seguenti informazioni alle intestazioni e ai piè di pagina dei rapporti.

Nota: Eseguire un backup dei modelli di rapporto esistenti prima di modificarli.

Tabella 6-8: Elementi base del design

Elemento	Definizione
Printing Date	(Data di stampa) La data in cui è stato stampato il documento.

Tabella 6-8: Elementi base del design (continua)

Elemento	Definizione
Printing Time	(Ora di stampa) L'ora in cui è stato stampato il documento.
Operator	(Operatore) L'operatore che ha stampato il documento.
Workstation	(Stazione di lavoro) La stazione di lavoro da cui è stato stampato il documento.
Page n of N	(Pagina n di N) Numero di pagina sul numero totale di pagine.
Custom Field	(Campo personalizzato) Creare testo personalizzato qui.
Analyst Version	(Versione di Analyst) Versione del software Analyst MD.
User Type	(Tipo di utente) Tipo di utente (sicurezza).
Electronic Signature	(Firma elettronica) Indica se la funzionalità di firma elettronica (sicurezza) è abilitata o disabilitata.

Tabella 6-9: Elementi di acquisizione

Elemento	Definizione
Acquisition File	Il nome del file di dati con le informazioni di acquisizione campione.
Acquisition Date	Data dell'acquisizione del campione.
Acquisition Time	Ora dell'acquisizione del campione.
Operator	Nome dell'operatore che ha eseguito il lotto del campione.
Batch Name	Nome del lotto.
Sample Number	Numero correlato al campione.
Sample Name	Nome del campione.
Sample Comment	Commento sul campione inserito tramite Acquisition Method Editor.
Sample ID	Numero di identificazione del campione.
Scan Mode	Il metodo in cui il sistema calcola i punti di massa per una scansione, per una scansione di intervallo di massa completo.

Tabella 6-9: Elementi di acquisizione (continua)

Elemento	Definizione
Scan Type and Polarity	Tipo di scansione di acquisizione (Q1, Q3, MRM, Product ion, Precursor ion, neutral loss/gain) e polarità del metodo di acquisizione (positiva o negativa).
Scan Mass(es)	Ioni o frammenti di ioni da sottoporre a scansione.
Dwell Time	Tempo impiegato dal sistema per sottoporre a scansione una determinata massa.
Pause Time	Una pausa tra la scansione degli intervalli di massa o tra un esperimento e l'altro.
Ion Energy	L'energia ionica proviene dal metodo di acquisizione ed è correlata all'energia di collisione o alla tensione della sorgente di ionizzazione IonSpray.
Collision Energy	L'energia di collisione proviene dal metodo di acquisizione ed è correlata alla tensione della sorgente di ionizzazione IonSpray.
Period and Experiment	Un periodo contiene una raccolta di esperimenti. Un esperimento contiene diverse proprietà quali Scan Type, Scan Mode, Resolution, Ion Source Parameters e una raccolta di masse o intervalli di massa.
State Table Parameters	I parametri dello spettrometro di massa usati nell'esperimento.
Pompa	Nome della pompa usata per l'esperimento.
Autocampionatore	Nome dell'autocampionatore usato per l'esperimento.
Custom Annotation	Testo personalizzato aggiunto in Batch Editor.
Collected By	Nome della persona che ha raccolto i dati.

Tabella 6-10: Elementi di quantificazione

Elemento	Definizione
Results Table Name	Nome della Results Table.
Results Table Path	Ubicazione della Results Table.
Method Name	Nome del metodo di quantificazione.
Method Path	Ubicazione del file del metodo.
Project Name	Nome del progetto.

Personalizzazione dei rapporti

Il Report Template Editor fornisce un modo per personalizzare i rapporti impostando intestazioni, piè di pagina e layout di pagina. Usare i modelli di rapporto sia con la stampa che con i dati esportati in un'altra applicazione.

La stampa include diversi tipi di elementi:

- **Finestra:** le finestre si aprono nell'area di lavoro della finestra software, sotto la barra degli strumenti, e a destra della barra di navigazione. La stampa di una finestra stampa tutto ciò che è visualizzato in quello spazio.
- **Riquadro:** i riquadri fanno parte di una finestra disposta in modo tale che non si sovrappongano e siano sempre completamente visibili. Ad esempio, la finestra Method Editor contiene due riquadri: il riquadro Browser e il riquadro Method Editor. Gli utenti possono stampare le informazioni da ciascun riquadro nella finestra.
- **Rapporto:** i rapporti sono serie strutturate di informazioni create nel software. Alcuni rapporti possono essere stampati direttamente, come i rapporti di calibrazione. È possibile esportare altre informazioni, come Results Table di batch e quantificazione.

Anteprima, stampa ed esportazione di report

I metodi di acquisizione, i lotti, le Results Table di quantificazione e le Results Table dei grafici possono essere esportati come report. Altri tipi di informazioni, quali dati calcolatore, possono essere esportati ma non possono essere personalizzati con un modello di rapporto.

Molte aree visibili sullo schermo possono essere stampate. Utilizzando la funzionalità Print Preview, l'utente può vedere l'anteprima, ridimensionare o copiare i grafici.

Un report esportato viene salvato in un formato file adatto a programmi quali Notepad, Microsoft Word, Excel o software LIMS (Laboratory Information Management System).

Esportare i rapporti nei seguenti formati:

- csv
- doc
- pdf
- txt

I formati disponibili dipendono dalle informazioni che vengono esportate. Ad esempio, un grafico può essere esportato come pdf. Una tabella di dati può essere esportata come un file txt.

Per inserire informazioni aggiuntive nell'intestazione o nel piè di pagina di un rapporto, stampare il rapporto utilizzando un modello di rapporto appropriato.

Tabella 6-11: Anteprima, stampa ed esportazione di report

Per eseguire questa operazione	Procedere come segue
Per l'anteprima di un grafico	Fare clic su File > Print Preview > Pane .
Per stampare un rapporto senza un modello	Fare clic su File > Print e fare clic poi sul rapporto da stampare.
Per stampare un rapporto utilizzando un modello	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic su File > Print & Report Setup.2. Nella sezione Report Template, selezionare il modello da utilizzare e fare clic su OK.
Per esportare un report	<ol style="list-style-type: none">1. Fare clic su File > Export.2. Nel campo File, digitare il nome del file.3. Nell'elenco Save as type, selezionare il tipo di file.4. Se si esporta un report in modalità Quantitate, selezionare All Columns o Visible Columns nella sezione Export, quindi fare clic su Save.

Results Table

Le Results Table riassumono la concentrazione calcolata di un analita in ogni campione sconosciuto in base alla curva di calibrazione. Esse comprendono anche le curve di calibrazione e le statistiche relative ai risultati.

Esportare i dati da una Results Table ad un file txt da utilizzare in altre applicazioni (ad esempio, Microsoft Excel). È possibile esportare tutti i dati possibili nella tabella o solo i dati presenti nelle colonne visibili.

Nota: Si consiglia all'utente di utilizzare solo i metodi controllati quali l'esportazione delle Results Table e la creazione di rapporti per emettere dati dal software Analyst MD. Le altre fonti di emissione di dati come copia dalle Results Table e incolla non sono controllate e non devono essere utilizzate.

I dati in una Results Table possono essere ordinati in tre modi diversi:

- Ordinare rapidamente la tabella in base a una/tre colonne, usando uno dei pulsanti **Sort**. Questo criterio di ordinamento non può essere salvato.
- Creare un ordinamento specifico per la tabella per salvare il criterio di ordinamento insieme alla tabella corrente. Gli ordinamenti specifici consentono di ordinare la tabella corrente su una-tre colonne e di salvare il criterio per utilizzarlo con la tabella in questione.
- Utilizzare un ordinamento preimpostato precedentemente creato Creare e salvare un ordinamento, applicandolo successivamente ad una Results Table.

Suggerimento! Per salvare un ordinamento o qualsiasi altra impostazione tabella, fare clic con il pulsante destro del mouse nella tabella, quindi fare clic su **Table Settings > Export To New Table Settings**. L'ordinamento e altri parametri possono essere usati nel progetto corrente. Per utilizzare le impostazioni tabella in un progetto diverso, copiarle in un altro progetto facendo clic su **Tools > Project > Copy Data**. Selezionare **Source Project Name** e **Target Project Name**, selezionare la casella di controllo per **Table Settings** in Directories, quindi fare clic su **Copy**. Se le **Table Settings** devono essere usate in un nuovo progetto, il nuovo progetto deve essere creato prima di copiare **Table Settings**.

Visualizzazione di un layout specifico per Results Table

La visualizzazione predefinita per le Results Table è Full Layout o Summary Layout. In presenza di più analiti per campione, ogni analita può essere visualizzato in Analyte Layout.

Con una Results Table aperta e attiva, fare clic con il pulsante destro del mouse, quindi fare clic su uno dei seguenti campi:

Tabella 6-12: Layout delle Results Table

Campo	Descrizione
Full	Fare clic per visualizzare Full Layout.
Summary	Fare clic su un nome di campo.
Analyte	Fare clic su un singolo analita per visualizzare Analyte Layout. Quando si visualizzano i risultati MRM o dell'algoritmo <i>Scheduled</i> MRM, gli utenti possono fare clic su Analyte per mostrare un elenco degli ID composto.
Analyte Group	Fare clic su un gruppo di analiti per visualizzare Analyte Group Layout. Suggerimento! È innanzitutto necessario creare un nuovo gruppo di analiti. A tale scopo, fare clic con il pulsante destro del mouse nella Results Table, quindi fare clic su Analyte Group > New .
Sample Type	Fare clic per mostrare un tipo di campione specifico.

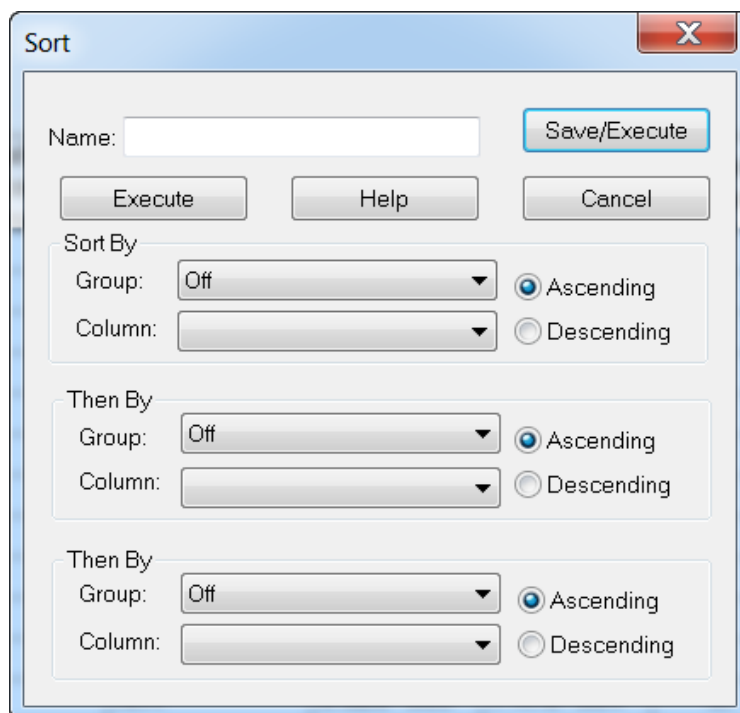
Ordinamento dei dati nelle Results Table

1. Selezionare fino ad un massimo di tre colonne nella Results Table, nell'ordine in cui devono essere ordinate.
2. Compiere una delle seguenti operazioni:
 - Per ordinare in senso ascendente, fare clic su **A-Z**.
 - Per ordinare in senso discendente, fare clic su **Z-A**.

Ordinamento di una Tabella dei risultati e salvataggio dei criteri di ordinamento

1. Fare clic con il pulsante destro nella Tabella dei risultati, quindi fare clic su **Sort > New**.

Figura 6-13: Finestra di dialogo Sort

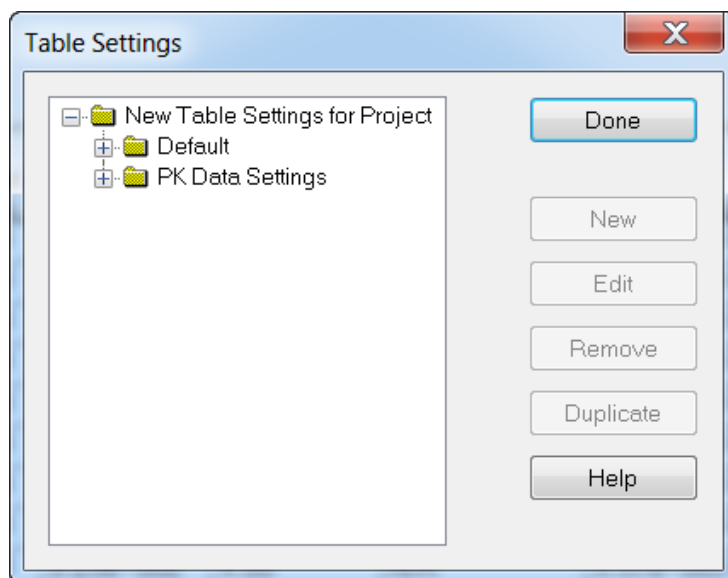


2. Nel campo **Name**, digitare il nome del nuovo ordinamento.
3. Per ogni regola di ordinamento, nelle sezioni **Sort By** e **Then By**, eseguire le seguenti operazioni:
 - Nell'elenco **Group**, selezionare il tipo di gruppo in base al quale ordinare.
 - Nell'elenco **Column**, selezionare la colonna in base alla quale ordinare.
 - Selezionare il senso di ordinamento: **Ascending** o **Descending**.
4. Compiere una delle seguenti operazioni:
 - Per eseguire l'ordinamento, salvare i criteri di ordinamento, chiudere la finestra di dialogo **Sort** e fare clic su **Save/Execute**.
 - Per eseguire l'ordinamento e chiudere la finestra di dialogo **Sort** senza salvare i criteri di ordinamento, fare clic su **Execute**.

Salvataggio dei criteri di ordinamento di default per le future Results Table

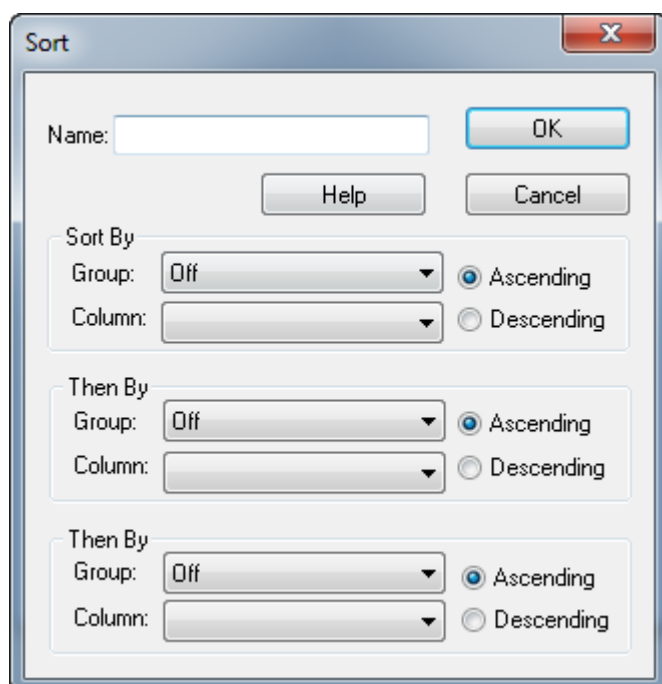
1. Fare clic su **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Figura 6-14: Finestra di dialogo Table Setting



2. Espandere la cartella **Table Settings** e fare doppio clic sulla cartella **Default**.
3. Dalla cartella espansa **Default**, selezionare la cartella **Sorts**.
4. Fare clic su **New**.

Figura 6-15: Finestra di dialogo Sort



5. Digitare il nome nel campo **Name**.

6. Per ogni regola di ordinamento da impostare nella sezione Sort By, eseguire le seguenti operazioni:
 - a. Nell'elenco **Group**, selezionare il tipo di colonna.
 - b. Nell'elenco **Column**, selezionare la colonna.
 - c. Selezionare il senso di ordinamento: **Ascending** o **Descending**.
7. Per salvare i criteri e chiudere la finestra di dialogo Sort, fare clic su **OK**.
8. Fare clic su **Done**.

Ordinamento di una Results Table in base a criteri di ordinamento preimpostati

Fare clic con il pulsante destro nella Results Table, fare clic su **Sort** e selezionare il nome dell'ordinamento.

Informazioni sull'uso delle query con le Results Table

Una query è una richiesta di record in una Results Table impostata da determinate condizioni utilizzando criteri di selezione matematica o testuale. Applicare una query durante il processo di generazione di una Results Table o dopo che è stata generata. Questi due tipi di query sono chiamate query predefinita e query specifica per tabella. Fare riferimento alla sezione: [Query predefinite e query specifiche per tabella](#).

Si consiglia all'utente di convalidare tutte le query usate per analizzare i dati in una Results Table.

Confronto dei risultati tra i lotti

Il numero e i nomi degli analiti devono essere gli stessi per i dati da combinare nella finestra Statistics.

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Tools > Statistics**.
3. Eseguire una delle seguenti operazioni:
 - Per disporre i risultati per **Results Table**, selezionare **Group By Batch** nell'elenco **Conc. as Rows**.
 - Per disporre i risultati in ordine di concentrazione, selezionare **Group By Concentration** nell'elenco **Conc. as Rows**.
 - Per disporre i risultati in ordine di concentrazione senza una riga che mostra le statistiche di ogni gruppo o lotto, selezionare **Group By Concentration (no All)** nell'elenco **Conc. as Rows**.

Il software ordinerà i risultati. Al termine di ogni lotto o gruppo, appariranno una o due righe aggiuntive: **All** (statistica di tutte le tabelle dei risultati di quel gruppo) e **Average** (statistica delle statistiche per quel lotto o gruppo).

Come i livelli di concentrazione influenzano i risultati

La concentrazione è definita per tutti i QC e standard. Se c'è una modifica nella precisione del livello di concentrazione superiore alla quantità definita nel campo Max. Variation nella finestra di dialogo Create Default Query, questa informazione viene visualizzata nella Results Table.

Layout delle Results Table

Il software ha le seguenti visualizzazioni predefinite della Results Table.

- [Visualizzazione Full Layout](#)
- [Visualizzazione Summary Layout](#)
- [Visualizzazione Analyte Layout](#)
- [Visualizzazione Analyte Group Layout](#)
- [Visualizzazione Sample Type Layout](#)

Ciascun analita da un campione di analiti multipli può essere mostrato nella visualizzazione Analyte Layout. La visualizzazione predefinita è Full layout.

Visualizzazione Full Layout

La visualizzazione predefinita Full Layout mostra i dati per tutti gli analiti nel batch di quantificazione. Le colonne visualizzate dipendono dalle colonne selezionate nella finestra di dialogo Results Table Columns, e dalle impostazioni selezionate nella seconda pagina del Quantitation Method Wizard.

Figura 6-16: Visualizzazione Sample Full

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration
1	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 1	2.45e+002	6.02e+001	0.00
2	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 2	1.25e+004	4.53e+003	0.00
3	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.80e+002	2.53e+002	0.00
4	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.39e+004	4.93e+003	0.00
5	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.55e+003	5.08e+002	0.00
6	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.28e+004	4.27e+003	0.00
7	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.32e+003	1.04e+003	0.00
8	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.14e+004	4.20e+003	0.00
9	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.12e+003	2.33e+003	0.00
10	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.23e+004	4.35e+003	0.00
11	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.50e+004	4.77e+003	0.00
12	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.34e+004	4.83e+003	0.00
13	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.70e+004	1.20e+004	0.00
14	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.51e+004	5.29e+003	0.00
15	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.73e+004	2.49e+004	0.00
16	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.50e+004	5.41e+003	0.00
17	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.61e+004	2.44e+004	0.00
18	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	8.04e+003	3.13e+003	0.00

Visualizzazione Summary Layout

La visualizzazione Summary Layout contiene le colonne bloccate e, in quelle rimanenti, il campo prescelto per ciascun analita. Ad esempio, se dal menu è selezionato Analyte Peak Area per due analiti, sono visibili le colonne Sample Name e Analyte Peak Area per quegli analiti. La visualizzazione Summary Layout include anche le colonne Formula e Custom, se esistenti.

Figura 6-17: Esempio di visualizzazione Summary Layout

	Sample Name	Peak 1	Peak 2
1	B series 0 blank	2.45e+002	1.25e+004
3	B series 0.1 ng/mL	7.80e+002	1.39e+004
5	B series 0.2 ng/mL	1.55e+003	1.28e+004
7	B series 0.5 ng/mL	3.32e+003	1.14e+004
9	B series 1.0 ng/mL	7.12e+003	1.23e+004
11	B series 2.0 ng/mL	1.50e+004	1.34e+004
13	B series 5.0 ng/mL	3.70e+004	1.51e+004
15	B series 10.0 ng/mL	7.73e+004	1.50e+004
17	B series 20.0 ng/mL	7.61e+004	8.04e+003
19	Unknown concentra	1.23e+004	8.39e+003
21	Unknown concentra	8.71e+003	5.71e+003
23	Unknown concentra	1.12e+004	7.18e+003
25	Unknown concentra	1.32e+004	7.36e+003
27	Unknown concentra	1.25e+004	7.14e+003
29	Unknown concentra	1.10e+004	6.50e+003
31	Unknown concentra	1.36e+004	7.94e+003

Visualizzazione Analyte Layout

La visualizzazione Analyte Layout contiene i dati per un determinato analita. Tutti gli altri analiti sono nascosti. Ad esempio, se si seleziona l'analita A, si vedono tutti i dati per l'analita A. Le colonne visualizzate dipendono dalle colonne selezionate nella finestra di dialogo Results Table Columns e dalle impostazioni selezionate nella seconda pagina del Quantitation Method Wizard.

Una visualizzazione Analyte Layout, con il picco 1 selezionato, potrebbe avere l'aspetto del seguente grafico. In questa visualizzazione, viene eseguita ogni altra riga mostrata nella visualizzazione Full Layout.

Figura 6-18: Visualizzazione Analyte Layout di esempio

	Sample Name	File Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration	Use Record	Record Modified
1	B series 0 blank	QuanData.Wiff	2.45e+002	5.02e+001	0.00		<input type="checkbox"/>
3	B series 0.1 ng/mL	QuanData.Wiff	7.80e+002	2.53e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5	B series 0.2 ng/mL	QuanData.Wiff	1.55e+003	5.08e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
7	B series 0.5 ng/mL	QuanData.Wiff	3.32e+003	1.04e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9	B series 1.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.12e+003	2.33e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
11	B series 2.0 ng/mL	QuanData.Wiff	1.50e+004	4.77e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
13	B series 5.0 ng/mL	QuanData.Wiff	3.70e+004	1.20e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
15	B series 10.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.73e+004	2.49e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
17	B series 20.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.61e+004	2.44e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
19	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.23e+004	4.30e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
21	Unknown concentra	QuanData.Wiff	8.71e+003	2.53e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
23	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.12e+004	3.40e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
25	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.32e+004	4.24e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
27	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.25e+004	4.04e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
29	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.10e+004	3.96e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
31	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.36e+004	5.16e+003	N/A		<input type="checkbox"/>

Visualizzazione Analyte Group Layout

La visualizzazione Analyte Group Layout contiene i dati per gli analiti che appartengono ad un determinato gruppo. Le colonne selezionate come indicato nella finestra di dialogo Results Table Columns sono visualizzate nella Results Table. Fare riferimento al seguente grafico. Mostra la colonna **Analyte Peak Name** nella Results Table per mostrare i nomi degli analiti che appartengono al gruppo.


Figura 6-19: Visualizzazione Analyte Group Layout di esempio

Formula:		Analyte Group: Minoxidol Only			
		Query: None			
		Idle			
		Sort: Unsorted			
	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

Visualizzazione Sample Type Layout

Il layout Sample Type consente all'utente di filtrare la Results Table per tipo di campione.

Figura 6-20: Visualizzazione Sample Type Layout

<div></div> <div>Sample Type: Standard Query: None Idle Sort : Unsorted</div>				
	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)
1	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.63e+005
2	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.68e+005
3	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.31e+005
4	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.11e+005
5	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.58e+005
6	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.76e+005
7	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.72e+005
8	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.94e+005
9	STD 5	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.61e+005

Campi della Results Table

Aggiungere colonne alla Results Table standard per visualizzare i dati DAD (rilevatore a serie di diodi) per i campi Analyte, Internal Standard e Record.

Campi Formula

I campi Formula mostrano i risultati di una formula in stile foglio di calcolo definito dall'utente. Il campo Formula posizionato nella parte alta della Results Table viene mostrato solo se nella Results Table è presente almeno una colonna Formula. Il campo Formula diventa attivo quando le celle dalla colonna Formula vengono selezionate. Anche il pulsante Delete Formula Column che si trova sotto il campo Formula diventa disponibile quando la colonna Formula viene selezionata.

Si raccomanda all'utente di convalidare i risultati se si utilizza una colonna di formule.

Campi personalizzati

I campi personalizzati contengono informazioni definite durante il processo di acquisizione. Quando si acquisiscono i campioni, gli utenti possono creare colonne personalizzate e definire i tipi di dati da inserire nelle colonne. Quando una colonna fa parte di una Results Table, può essere trattata come qualsiasi altra colonna (ad esempio, spostarla, nascondere, basarvi una formula).

Campi della colonna Internal Standards

Le colonne Internal Standards della Results Table mostrano informazioni sullo standard interno dopo l'analisi. La seguente tabella mostra i campi disponibili.

Tabella 6-13: Colonne Internal Standards

Colonne	Descrizione
IS Peak Name	Nome del picco dello standard interno.
IS Units	Le unità in cui viene fornito lo standard interno.
IS Peak Area	Area del picco dello standard interno.
IS Peak Height	Altezza del picco dello standard interno.
IS Concentration	Concentrazione nota dello standard interno. Si applica ai tipi di campione di controllo qualità e standard. Vengono indicati degli zeri per i tipi di campione solvente, vuoto e vuoto doppio. N/A viene indicato per gli sconosciuti.
IS Retention Time	Il tempo di ritenzione cromatografica determinato dal software.
IS Expected Retention Time	Il tempo di ritenzione del campione rappresentativo. Preso dal metodo di quantificazione.
IS Retention Time Window	La finestra del tempo di ritenzione specificata nel metodo di quantificazione.
IS Centroid Location	Il tempo di ritenzione medio pesato in base all'intensità per l'analita. Vengono identificate le aree di picco fino a questo tempo e successivamente.
IS Start Scan	Il numero di ciclo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove inizia il picco.
IS Start Time	Il tempo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove inizia il picco.
IS Stop Scan	Il numero di ciclo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove finisce il picco.
IS Stop Time	Il tempo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove finisce il picco.
IS Integration Type	Il metodo con cui è stata rilevata e integrata la linea di base quando è stato rilevato il picco. I tipi sono manuale e automatico (Baseline-to-Baseline , Valley , Exponential Skim e Exponential Child).
IS Signal to Noise	Il rapporto segnale-rumore del picco.
IS Peak Width	Il rapporto tra l'altezza del picco e la sua larghezza.
IS UV Range	Intervallo UV dello standard interno.
IS UV Channel	Il canale UV dello standard interno.
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(Sola lettura) La larghezza del picco al 50% dell'altezza del picco.

Tabella 6-13: Colonne Internal Standards (continua)

Colonne	Descrizione
IS Baseline Slope (%/min.)	(Sola lettura) La colonna che mostra la pendenza della linea di base.
IS Peak Asymmetry	(Sola lettura) La colonna che mostra l'asimmetria del picco calcolata con la seguente formula: $[(\text{tempo di fine picco}) - (\text{tempo di ritenzione})] / [(\text{tempo di ritenzione}) - (\text{tempo di inizio picco})]$ I valori vicino a 1,0 indicano picchi simmetrici, i valori superiori a 1,0 indicano picchi di scodamento e i valori inferiori a 1,0 indicano picchi di avanzamento.
IS Processing Alg	(Sola lettura) Colonna che mostra l'algoritmo di elaborazione usato.
IS Integration Quality	L'Integration Quality Index indica la qualità dell'integrazione del picco. I valori più vicini a 1 indicano i picchi ben integrati e i valori più vicini a 0 indicano picchi scarsamente integrati.

Campi Record

Le colonne **Record** nella Results Table contengono informazioni aggiuntive su ogni record campione (informazioni applicabili solo all'analita, non allo standard interno). La seguente tabella mostra i campi disponibili.

Tabella 6-14: Colonne Record

Colonne	Descrizione
Use Record	Indica se questo record deve essere incluso per la calibrazione. Si applica agli standard e ai QC. Se la casella di controllo non è selezionata, gli standard e i QC non utilizzati sono barrati nella tabella Statistics.
Record Modified	Indica se il metodo di quantificazione utilizzato per il record era stato modificato in qualche modo rispetto all'originale.
Calculated Concentration	Concentrazione dell'analita calcolata utilizzando la curva di calibrazione.
Relative Retention Time	Il rapporto dei tempi di ritenzione dello standard interno e dell'analita.
Accuracy	La concentrazione calcolata divisa per la concentrazione nota (in percentuale).
Response Factor	L'area o l'altezza del picco (in base all'opzione di regressione) diviso per la concentrazione dell'analita.

Colonne analiti

Le colonne analiti nella Results Table contengono informazioni su ciascun analita e standard interno (se ne è stato usato uno) dopo l'analisi. La seguente tabella mostra i campi disponibili.

Tabella 6-15: Results Table: colonne analiti

Colonna	Descrizione
Analyte Peak Name	Il nome dell'analita.
Analyte Units	Le unità in cui vengono fornite le concentrazioni dell'analita.
Analyte Peak Area	L'area dell'analita.
Analyte Peak Height	L'altezza del picco dell'analita.
Analyte Concentration	La concentrazione nota effettiva dell'analita. Si applica ai tipi di campione di controllo qualità e standard. Vengono indicati degli zeri per i tipi di campione solvente, vuoto e vuoto doppio. N/A viene indicato per gli sconosciuti.
Analyte Retention Time	Il tempo di ritenzione cromatografica determinato dal software.
Analyte Expected Retention Time	Il tempo di ritenzione del campione rappresentativo prelevato dal metodo di quantificazione.
Analyte Retention Time Window	La finestra del tempo di ritenzione specificata nel metodo di quantificazione.
Analyte Centroid Location	Il tempo di ritenzione medio pesato in base all'intensità per l'analita. Vengono identificate le aree di picco fino a questo tempo e successivamente.
Analyte Start Scan	Il numero di ciclo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove inizia il picco.
Analyte Start Time	Il tempo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove inizia il picco.
Analyte Stop Scan	Il numero di ciclo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove finisce il picco.
Analyte Stop Time	Il tempo associato alla combinazione di periodo o esperimento dove finisce il picco.
Analyte Integration Type	Il metodo con cui è stata rilevata e integrata la linea di base quando è stato rilevato il picco. I tipi sono manuale e automatico (Baseline-to-Baseline, Valley, Exponential Skim ed Exponential Child).

Tabella 6-15: Results Table: colonne analiti (continua)

Colonna	Descrizione
Analyte Signal to Noise	Il rapporto segnale-rumore del picco confrontato con la linea di base.
Analyte Peak Width	Il rapporto tra l'altezza del picco e la sua larghezza.
Analyte UV Range	L'intervallo UV dell'analita.
Analyte UV Channel	Il canale UV dell'analita.
Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)	(Sola lettura) La colonna che mostra la larghezza del picco al 50% dell'altezza del picco.
Analyte Baseline Slope (%/min.)	(Sola lettura) La colonna che mostra la pendenza della linea di base.
Analyte Peak Asymmetry	<p>(Sola lettura) La colonna che mostra l'asimmetria del picco calcolata con la seguente formula:</p> $[(\text{tempo di fine picco}) - (\text{tempo di ritenzione})] / [(\text{tempo di ritenzione}) - (\text{tempo di inizio picco})]$ <p>I valori vicino a 1,0 indicano picchi simmetrici, i valori superiori a 1,0 indicano picchi di scodamento e i valori inferiori a 1,0 indicano picchi di avanzamento.</p>
Analyte Processing Alg	Colonna di sola lettura che mostra l'algoritmo di elaborazione usato.
Analyte Integration Quality	L'indice Integration Quality indica la qualità dell'integrazione del picco. I valori più vicini a 1 indicano i picchi ben integrati e i valori più vicini a 0 indicano picchi scarsamente integrati. Ciò facilita la verifica dei picchi perché gli utenti possono vedere i picchi con i valori bassi di Analyte Integration Quality per la verifica manuale. Inoltre, gli utenti possono interrogare i dati per i valori Analyte Integration Quality aventi un valore inferiore a quello che considerano accettabile per mostrare e rivedere manualmente un sottogruppo dei dati.

Colonne campione

Le colonne campione nella Results Table mostrano informazioni sul campione comuni a tutti gli analiti. Il vuoto e il vuoto doppio possono essere definiti in modo diversa da un laboratorio all'altro. Le seguenti tabelle mostrano i campi disponibili.

Tabella 6-16: Colonne campione

Colonna	Descrizione
Sample Name	Il nome che l'utente ha assegnato al campione quando è stato acquisito.
Sample ID	Identificatore definito dall'utente, associato al campione.
Sample Type	<p>Tutti gli analiti all'interno di un campione devono avere lo stesso tipo di campione. Viene visualizzato uno dei seguenti tipi di campione:</p> <p>Unknown: contiene gli analiti di cui è necessario determinare le concentrazioni.</p> <p>Standard: un campione con concentrazione di analita nota. Viene usato per scopi di calibrazione.</p> <p>Quality Control: un campione con concentrazione di analita nota. Viene usato per controllare la precisione della curva standard.</p> <p>Solvent: conferma che lo spettrometro di massa è pulito. I solventi non vengono eseguiti tramite il processo di preparazione campione.</p> <p>Blank: un campione con concentrazione zero che non viene usato in regressione.</p> <p>Double Blank: un campione preparato senza un analita dello standard interno o del campione. Conferma che il processo di estrazione non ha aggiunto niente.</p>
Sample Comment	Commento che descrive il campione.
Set Number	Numero che identifica un sottoinsieme di un intero lotto.
Acquisition Method	Il nome del metodo usato per acquisire i campioni.
Acquisition Date	Data e ora in cui è stata eseguita l'acquisizione.
Rack Type	Identificatore associato al tipo di rack autocampionatore usato (se presente).
Rack Number	La posizione rack in cui è stato posizionato il campione quando è stato acquisito. (Negli autocampionatori a rack singolo, è sempre 1.)
Vial Position	Posizione nella piastra dell'autocampionatore in cui è stata posizionata la fiala.
Plate Type	Identificatore per il tipo di piastra usata (solo rack multipiastra).
Plate Number	Posizione della piastra sul rack (solo rack multipiastra).
File Name	Nome del file di dati grezzi. Questo nome non è univoco perché in un file di dati singolo possono essere contenuti i dati da molti campioni.

Analisi quantitativa dei dati

Tabella 6-16: Colonne campione (continua)

Colonna	Descrizione
Dilution Factor	Quantità con cui è stato diluito il campione. Viene usata per determinare la concentrazione calcolata.
Sample Annotation	Commenti aggiuntivi che descrivono il campione.
Weight-to-Volume Ratio	Il rapporto peso-volume per il campione.

Tabella 6-17: Colonne DAD

Colonna	Descrizione
Analyte Peak Area for DAD	Area del picco dell'analita (mAU/min).
Analyte Peak Height for DAD	Altezza del picco dell'analita (mAu).
Analyte Wavelength Ranges	Intervallo delle lunghezze d'onda (nm).
IS Peak Area for DAD	Area del picco dello standard interno (mAU/min).
IS Wavelength Ranges	Intervallo delle lunghezze d'onda (nm).
IS Peak Height for DAD	Altezza del picco dello standard interno (mAU), concentrazione calcolata per DAD.

La tabella seguente mostra i campi che è possibile aggiungere alla Results Table per i dati acquisiti da un ADC (convertitore analogico-digitale).

Tabella 6-18: Colonne ADC











Colonna	Descrizione
Analyte Channel	Il canale ADC da cui è stato acquisito l'analita.
Analyte Wavelength Ranges	Intervallo delle lunghezze d'onda (nm).
IS Channel	Il canale ADC da cui è stato acquisito lo standard interno.
IS Wavelength Ranges	Intervallo delle lunghezze d'onda (nm).

Suggerimenti per la Results Table

Per fare questo...	... fare questo
Query specifiche per tabella: per visualizzare nuovamente l'intera tabella	Fare clic con il pulsante destro del mouse nella Results Table, quindi fare clic su Query > Show All . La query può essere nuovamente applicata o modificata.
Per esaminare le curve di calibrazione	Fare clic con il pulsante destro del mouse in un punto qualsiasi della curva, fare clic su Active Plot , quindi selezionare la curva da tracciare per prima.
Verifica statistica del campione: per verificare un singolo picco	Selezionare la casella di controllo Display the Data Set(s) , quindi, nella colonna Data Point, fare doppio clic sul punto di dati che rappresenta il picco. Il software apre la finestra Peak Review con il picco selezionato dall'utente.
Results Tables: Per riportare la Results Table nel suo ordine originale	Fare clic con il pulsante destro del mouse sulla Results Table e fare clic su Sort > Sort By Index .

Icone della barra degli strumenti

A

Icona	Nome	Funzione
	Sottrazione fondo	Esegue una sottrazione fondo dopo che i range di fondo sono stati selezionati.
	Sottrazione range bloccati	Blocca i range di fondo selezionati. Se i range di fondo sono sbloccati, sarà possibile spostarli in maniera indipendente.
	Centroid	Calcola il centroide dei dati.
	Home Graph	Riporta il grafico alla sua scala originale.
	Overlay	Sovrappone i grafici.
	Cycle Overlays	Cicla tra i grafici sovrapposti.
	Sum Overlays	Aggiunge grafici insieme.
	Mostra strumento di interpretazione frammenti	Apri lo strumento Fragment Interpretation, il quale calcola i frammenti della scissione di singoli legami non ciclici a partire da un file .mol.
	Smooth	Arrotonda i dati utilizzando l'algoritmo di smussamento.
	Arrotondamento gaussiano	Arrotonda i dati utilizzando lo smussamento gaussiano.

PPG Exact Mass Table

B

Nella seguente tabella sono elencate le masse monoisotopiche esatte e le specie caricate (positive e negative) osservate con le soluzioni di calibrazione PPG (glicole di polipropilene). Le masse e gli ioni sono stati calcolati usando la formula $M = H[OC_3H_6]_nOH$, mentre per i frammenti MSMS di ioni positivi è stata utilizzata la formula $[OC_3H_6]_n(H^+)$. In tutti i calcoli, $H = 1,007825$, $O = 15,99491$, $C = 12,00000$ e $N = 14,00307$.

Nota: Quando si esegue una calibrazione con le soluzioni PPG, verificare di usare il picco isotopico corretto.

Tabella B-1: Masse esatte PPG

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
1	76,052	94,087	59,0	56,061	121,050
2	134,094	152,129	117,1	85,082	179,092
3	192,136	210,171	175,1	114,102	237,134
4	250,178	268,212	233,2	143,123	295,176
5	308,220	326,254	291,2	172,144	353,218
6	366,262	384,296	349,2	201,165	411,259
7	424,304	442,338	407,3	230,186	469,301
8	482,346	500,380	465,3	259,207	527,343
9	540,388	558,422	523,4	288,228	585,385
10	598,430	616,464	581,4	317,249	643,427
11	656,471	674,506	639,4	346,270	701,469

PPG Exact Mass Table

Tabella B-1: Masse esatte PPG (continua)

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
12	714,513	732,548	697,5	375,291	759,511
13	772,555	790,590	755,5	404,312	817,552
14	830,597	848,631	813,6	433,333	875,594
15	888,639	906,673	871,6	462,354	933,636
16	946,681	964,715	929,7	491,373	991,678
17	1004,723	1022,757	987,7	520,396	1049,720
18	1062,765	1080,799	1045,7	549,417	1107,762
19	1120,807	1138,841	1103,8	578,438	1165,804
20	1178,849	1196,883	1161,8	607,459	1223,845
21	1236,890	1254,925	1219,9	636,480	1281,887
22	1294,932	1312,967	1277,9	665,501	1339,929
23	1352,974	1371,009	1335,9	694,521	1397,971
24	1411,016	1429,050	1394,0	723,542	1456,013
25	1469,058	1487,092	1452,0	752,563	1514,055
26	1527,100	1545,134	1510,1	781,584	1572,097
27	1585,142	1603,176	1568,1	810,605	1630,138
28	1643,184	1661,218	1626,2	839,626	1688,180

Tabella B-1: Masse esatte PPG (continua)

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
29	1701,226	1719,260	1684,2	868,647	1746,222
30	1759,268	1777,302	1742,2	897,668	1804,264
31	1817,309	1835,344	1800,3	926,689	1862,306
32	1875,351	1893,386	1858,3	955,710	1920,348
33	1933,393	1951,428	1916,4	984,731	1978,390
34	1991,435	2009,469	1974,4	1013,752	2036,431
35	2049,477	2067,511	2032,5	1042,773	2094,473
36	2107,519	2125,553	2090,5	1071,794	2152,515
37	2165,561	2183,595	2148,5	1100,815	2210,557
38	2223,603	2241,637	2206,6	1129,836	2268,599
39	2281,645	2299,679	2264,6	1158,857	2326,641
40	2339,687	2357,721	2322,7	1187,878	2384,683
41	2397,728	2415,783	2380,7	1216,899	2442,724
42	2455,770	2473,805	2438,7	1245,920	2500,766
43	2513,812	2531,847	2496,8	1274,940	2558,808
44	2571,854	2589,888	2554,8	1303,961	2616,850
45	2629,896	2647,930	2612,9	1332,982	2674,892

PPG Exact Mass Table

Tabella B-1: Masse esatte PPG (continua)

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
46	2687,938	2705,972	2670,9	1362,003	2732,934
47	2745,980	2764,014	2729,0	1391,024	2790,976
48	2804,022	2822,056	2787,0	1420,045	2849,017
49	2862,064	2880,098	2845,0	1449,066	2907,059
50	2920,106	2938,140	2903,1	1478,087	2965,101
51	2978,147	2996,182	2961,1	1507,108	3023,143
52	3036,189	3054,224	3019,2	1536,129	3081,185
53	3094,231	3112,266	3077,2	1565,150	3139,227
54	3152,273	3170,307	3135,2	1594,171	3197,269
55	3210,315	3228,349	3193,3	1623,192	3255,311
56	3268,357	3286,391	3251,3	1652,213	3313,352
57	3326,399	3344,433	3309,4	1681,234	3371,394
58	3384,441	3402,475	3367,4	1710,255	3429,436
59	3442,483	3460,517	3425,5	1739,276	3487,478
60	3500,525	3518,559	3483,5	1768,297	3545,5202
61	3558,566	3576,601	3541,5	1797,318	3603,562
62	3616,608	3634,643	3599,6	1826,339	3661,604

Tabella B-1: Masse esatte PPG (continua)

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
63	3674,650	3692,685	3657,6	1855,359	3719,645
64	3732,692	3750,726	3715,7	1884,380	3777,687
65	3790,734	3808,768	3773,7	1913,401	3835,729
66	3848,776	3866,810	3831,7	1942,422	3893,771
67	3906,818	3924,852	3889,8	1971,443	3951,813
68	3964,860	3982,894	3947,8	2000,464	4009,855
69	4022,902	4040,936	4005,9	2029,485	4067,897
70	4080,944	4098,978	4063,9	2058,506	4125,938
71	4138,985	4157,020	4122,0	2087,527	4183,980
72	4197,027	4215,062	4180,0	2116,548	4242,022
73	4255,069	4273,104	4238,0	2145,569	4300,064
74	4313,111	4331,145	4296,1	2174,590	4358,106
75	4371,153	4389,187	4354,1	2203,611	4416,148
76	4429,195	4447,229	4412,2	2232,632	4474,190
77	4487,237	4505,271	4470,2	2261,653	4532,231
78	4545,279	4563,313	4528,3	2290,674	4590,273
79	4603,321	4621,355	4586,3	2319,695	4648,315

PPG Exact Mass Table

Tabella B-1: Masse esatte PPG (continua)

n	Massa esatta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Frammenti MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
80	4661,363	4679,397	4644,3	2348,716	4706,357
81	4719,404	4737,439	4702,4	2377,737	4764,399
82	4777,446	4795,481	4760,4	2406,758	4822,441

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 sulla versione o alla guida all'installazione del software fornita con il software.

Per reperire la documentazione del prodotto hardware, fare riferimento al DVD *Customer Reference* fornito con il sistema o il componente.

Contatti

Nota: per richiedere una versione stampata gratuita del presente documento, contattare sciex.com/contact-us.
