

---

# Logiciel Analyst MD

Guide de l'utilisateur avancé



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

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

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

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

**Usage réservé au diagnostic *in vitro*.** Produit(s) non disponible(s) dans tous les pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page [Web.sciex.com/diagnostics](http://Web.sciex.com/diagnostics).

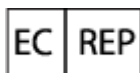
**Rx only.**

**La disponibilité des produits est variable en fonction des pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page [sciex.com](http://sciex.com).**

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

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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

IVD

CE

UK  
CA



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

# Table des matières

---

<b>Chapitre 1 : Informations générales</b>	<b>8</b>
Événements du logiciel Analyst MD	8
Filtrer le journal système pour trouver des informations concernant le logiciel	
Analyst MD	8
Fenêtre du logiciel Analyst MD	9
Modes du logiciel Analyst MD	10
AnalystService	11
Démarrer AnalystService	11
Arrêter AnalystService	12
Dossiers du projet API Instrument	12
Fichiers de programme	12
Projets et sous-projets	13
Sous-projets	13
Organisation de projet	14
Accès et sécurité	15
Espaces de travail	16
 <b>Chapitre 2 : Mode Tune and Calibrate</b>	 <b>18</b>
Réglage	19
Étalonnage	19
Réglage et étalonnage automatiques	19
(Facultatif) Sauvegarder manuellement les paramètres de l'instrument	20
(Facultatif) Restaurer les paramètres de l'instrument	20
Compound Optimization	20
Analyse par injection en flux continu	21
Perfusion	21
Infusion en T	21
 <b>Chapitre 3 : Méthodes d'acquisition</b>	 <b>22</b>
Dispositifs dans les méthodes d'acquisition	22
Ajout ou retrait d'un périphérique	22
Définir les propriétés de la pompe LC	23
Définir les propriétés de l'auto-échantillonneur	23
Définir les propriétés de la pompe à seringue intégrée	24
Définir les propriétés du four à colonne	24
Définir les propriétés de la vanne d'inversion	24
Définir les paramètres du détecteur à barrettes de diodes (Agilent)	25
Définir les propriétés du convertisseur analogique/numérique	25
Dynamic Fill Time	26
Expériences et périodes	26
Expériences	26

---

Périodes .....	27
MéthodesIDA (Information Dependent Acquisition) .....	27
Scheduled Ionization .....	28
Valeurs de compressibilité des solvants .....	30
Taille de la seringue versus débit .....	31
 <b>Chapitre 4 : Lots .....</b>	<b>33</b>
Éditeur de lots .....	33
Importer des fichiers de lot .....	34
Définir les détails de quantification dans l'éditeur de lots (facultatif) .....	35
 <b>Chapitre 5 : Analyse des données qualitatives .....</b>	<b>36</b>
Chromatogrammes .....	36
Spectres .....	36
Soustraction du bruit de fond .....	37
Effectuer une soustraction du bruit de fond pour un chromatogramme .....	37
Déverrouiller les pages .....	39
Soustraction de la ligne de base .....	39
Calculateurs .....	39
Calculateur Elemental Composition .....	40
Calculateur Hypermass .....	40
Calculateur Elemental Targeting .....	40
Calculateur Mass Property .....	40
Calculateur Isotopic Distribution .....	41
Accéder aux calculateurs .....	41
Pics centroïdés .....	41
Calculer le centroïde d'un pic .....	42
Analyse des données .....	42
Chromatogramme en courant ionique total .....	43
Chromatogramme d'ions extraits .....	43
Chromatogramme de pics de base .....	43
Chromatogramme de longueurs d'onde extraites .....	43
Détecteur à barrettes de diodes .....	43
Chromatogramme de longueurs d'onde totales .....	43
Superposer des graphiques .....	44
Alterner les graphiques superposés .....	44
Additionner les superpositions .....	44
Personnaliser les graphiques .....	45
Ajouter des légendes à un graphique .....	45
Ajouter du texte à un graphique .....	45
Compound Database .....	46
Graphiques de contour .....	46
Afficher un graphique de contour .....	48
Sélectionner une zone dans un graphique de contour .....	48
Définir l'intensité et l'absorbance dans un graphique de contour .....	48
Modifier les couleurs dans un graphique de contour .....	49
Algorithme Dynamic Background Subtraction .....	49
Interprétation de la fragmentation .....	49

---

## Table des matières

---

Connecter l'outil d'interprétation de la fragmentation à un spectre .....	50
Relier les fragments aux pics .....	50
Sélectionner une liaison dans une structure moléculaire .....	51
Afficher les isotopes .....	51
Afficher une différence de formule dans un spectre .....	51
Afficher une différence de formule dans la liste des fragments .....	52
Afficher une différence de formule dans une structure moléculaire .....	52
IDA Explorer .....	52
Bases de données de la bibliothèque .....	53
Alternier entre les bases de données existantes de la bibliothèque .....	54
Créer une base de données locale de la bibliothèque .....	55
Se connecter à une base de données de la bibliothèque sur serveur .....	57
Afficher tous les enregistrements de la bibliothèque .....	59
Ajouter un enregistrement dans la bibliothèque .....	59
Rechercher des enregistrements de la bibliothèque avec contraintes .....	60
Conseils pour la recherche en bibliothèque .....	61
Rechercher un spectre similaire .....	61
Afficher un composé à partir des résultats de recherche .....	63
Fichiers de données traitées .....	63
Enregistrer un fichier de données traitées .....	63
Ouvrir un fichier de données traitées .....	63
Données qualitatives .....	64
Rapport signal-bruit .....	64
Algorithmes de lissage .....	64
Données lissées utilisant l'algorithme de lissage .....	65
Lisser des données avec l'algorithme gaussien .....	66
Journaux système .....	66
Enregistrer le journal système et le transmettre au support .....	67
Filtrer le journal système pour trouver des informations concernant le logiciel Analyst MD .....	67
<b>Chapitre 6 : Analyse des données quantitatives .....</b>	<b>68</b>
Options d'étalonnage .....	68
À propos des courbes d'étalonnage .....	68
Sélectionner le meilleur type de régression .....	68
Sélectionner le meilleur facteur de pondération .....	69
Algorithmes d'intégration .....	70
Algorithmes d'intégration Analyst Classic et IntelliQuan .....	70
Outils de création de méthode de quantification .....	72
Assistants .....	72
Quantitation Method Editor .....	73
Semi-Automatic Method Editor .....	74
Parcelles métriques .....	75
Générer un tracé métrique temporaire .....	76
Générer un tracé métrique et enregistrer les critères de traçage .....	76
Enregistrer les critères de traçage par défaut pour les prochains tableaux de résultats .....	78
Paramètres Noise et Area Threshold .....	78
Recalculer les seuils de bruit et de surface .....	79

Intégration des pics .....	79
Examen des pics .....	80
Conseils pour l'examen des pics .....	80
Détecter les pics .....	80
Trouver le début potentiel du pic .....	81
Confirmer le début du pic .....	81
Trouver le sommet du pic .....	83
Trouver la fin du pic .....	85
Pics distincts .....	87
Requêtes .....	87
Requêtes sur le type d'échantillon .....	88
Requêtes par défaut et requêtes spécifiques à un tableau .....	88
Comment les variations de la précision affectent les résultats .....	89
Équations de régression .....	89
Options d'ajustement .....	90
Facteurs de pondération .....	92
Modèles de rapport .....	92
Rapports personnalisés .....	95
Aperçu, impression et exportation des rapports .....	95
Tableaux de résultats .....	96
Afficher une disposition spécifique des tableaux de résultats .....	97
Trier les données dans les tableaux de résultats .....	97
Trier un tableau de résultats et enregistrer les critères de tri .....	98
Enregistrer les critères de tri par défaut pour les prochains tableaux de résultats .....	99
Trier un tableau de résultats à l'aide des critères de tri prédéfinis .....	100
À propos de l'utilisation des requêtes avec les tableaux de résultats .....	100
Comparer les résultats entre les lots .....	101
Comment les niveaux de concentration affectent les résultats .....	101
Dispositions du tableau de résultats .....	101
Champs du tableau de résultats .....	104
Conseils relatifs au tableau de résultats .....	112
 <b>Annexe A : Icônes de la barre d'outils .....</b>	 <b>113</b>
 <b>Annexe B : Tableau des masses exactes du PPG .....</b>	 <b>114</b>
 <b>Nous contacter .....</b>	 <b>120</b>
Formation destinée aux clients .....	120
Centre d'apprentissage en ligne .....	120
Assistance technique SCIEX .....	120
Cybersécurité .....	120
Documentation .....	120

Le *Guide de l'utilisateur avancé* fournit des informations sur les fonctions du logiciel Analyst MD.

## Événements du logiciel Analyst MD

Le journal système contient les rapports des événements du système, notamment les erreurs, les avertissements et les messages. Utilisez Windows Event Viewer pour afficher les informations qui pourraient être utiles pour le dépannage et la réalisation des diagnostics du système. Pour utiliser efficacement les informations présentes dans le journal système, filtrez-le pour n'afficher que les éléments pertinents pour le logiciel.

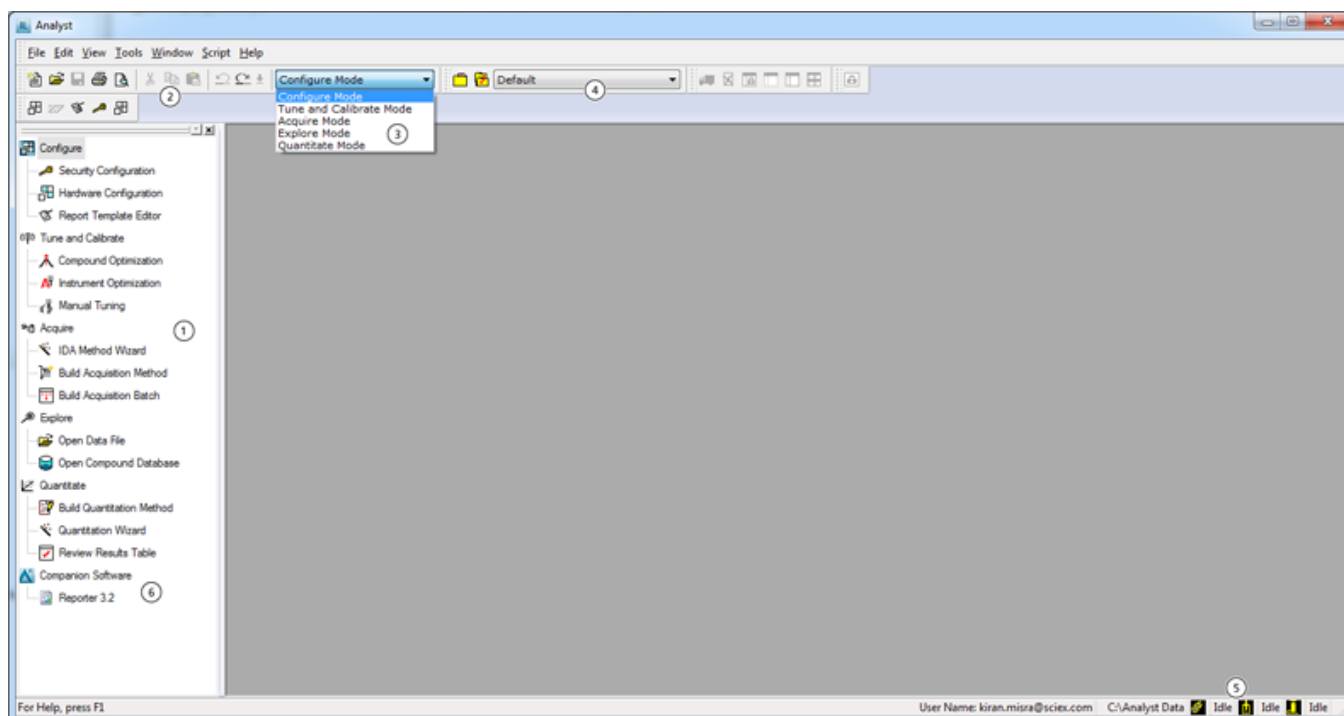
## Filtrer le journal système pour trouver des informations concernant le logiciel Analyst MD

1. Cliquez sur **View > Event Log**.  
La boîte de dialogue Event Viewer s'ouvre.
2. Double-cliquez sur le dossier **Windows Logs**.
3. Cliquez sur **Application**.
4. Cliquez sur **Action > Filter Current Log**.  
La boîte de dialogue Filter Current Log s'ouvre.
5. Sélectionnez **Analyst** dans le champ **Event Sources**.
6. Cliquez sur **OK**.  
La boîte de dialogue Event Viewer n'affiche maintenant que les événements concernant le logiciel Analyst MD.



# Fenêtre du logiciel Analyst MD

Illustration 1-1 : Fenêtre du logiciel Analyst MD



Élément	Description
1	<p>Barre de navigation : elle permet d'accéder aux différents modes du logiciel. Les utilisateurs peuvent personnaliser certains éléments de la barre de navigation pour les adapter à leurs préférences. Par exemple, les utilisateurs peuvent la redimensionner, la déplacer ou la fixer. Pour masquer la barre de navigation, cliquez sur × dans le coin supérieur droit. Pour afficher la barre de navigation, cliquez sur <b>View &gt; Navigation Bar</b>.</p> <p>Le niveau supérieur de l'arborescence de navigation comporte une icône représentant chaque mode du logiciel. Double-cliquez sur l'icône correspondant à un mode particulier pour développer ou réduire l'arborescence. Ceci permet d'afficher ou de masquer les icônes correspondant à la fonctionnalité disponible dans le mode sélectionné.</p>
2	<p>Barre de menus : elle change en fonction du mode. Certaines options comme Cut, Copy et Paste sont les mêmes dans chaque mode. D'autres options sont propres à certains modes et indisponibles dans d'autres modes.</p>
3	<p>Liste des modes : cliquez pour changer de mode. Chaque mode dispose d'icônes différentes dans la barre d'outils.</p>

Élément	Description
4	Liste des projets : cliquez pour modifier le projet dans lequel des données sont enregistrées.
5	État de l'instrument et des périphériques : la barre d'état contient des informations sur les activités en cours. La couleur indique l'état de l'instrument : vert (Prêt), jaune (Inactif), rouge (Erreur) ou blanc (pas de poste de travail de l'instrument local). Une icône indique l'état d'un instrument distant. Double-cliquez sur une icône pour ouvrir la fenêtre Device status.
6	Companion Software : contient les logiciels associés et installés, qui sont ouverts dans le logiciel.

## Modes du logiciel Analyst MD

Le logiciel est divisé en modes qui sont des zones fonctionnelles discrètes dans lesquelles les utilisateurs peuvent réaliser une gamme d'activités liées à une tâche principale. Les utilisateurs peuvent accéder aux modes via la barre de navigation ou la liste Mode dans la barre d'outils et peuvent passer d'un mode à un autre sans perdre leur travail.

**Tableau 1-1 : Modes du logiciel Analyst MD**

Nom	Description
<b>Configure</b>	(Configurer)Utilisez ce mode pour configurer les dispositifs et les paramètres système. Définissez plusieurs options et paramètres du logiciel, notamment la configuration matérielle et les paramètres des modèles de rapport.
<b>Tune and Calibrate</b>	(Régler et étalonner)Utilisez ce mode pour définir des options permettant de régler des instruments pour garantir des résultats optimaux. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"><li>• procéder à l'optimisation de l'instrument,</li><li>• effectuer un réglage manuel,</li><li>• modifier l'apparence des vues graphiques, sélectionner les types d'informations affichées à l'ouverture du fichier, et définir des options de liaison et autres options d'apparence,</li><li>• modifier les options de traitement.</li></ul>

Tableau 1-1 : Modes du logiciel Analyst MD (suite)

Nom	Description
<b>Acquire</b>	(Acquérir)Utilisez ce mode pour définir les options permettant de choisir le mode d'acquisition des échantillons. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"><li>• créer une méthode d'acquisition IDA à l'aide d'IDA Method Wizard,</li><li>• créer une méthode d'acquisition à l'aide d'Acquisition Method Editor,</li><li>• créer un lot à l'aide de Batch Editor,</li><li>• afficher la file d'attente à l'aide de Queue Manager,</li><li>• surveiller l'état de l'acquisition.</li></ul>
<b>Explore</b>	(Explorer)Utilisez ce mode pour effectuer une analyse qualitative des échantillons. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"><li>• afficher un graphique,</li><li>• afficher un chromatogramme,</li><li>• afficher un spectre,</li><li>• afficher des données en temps réel lors de l'acquisition du lot.</li></ul>
<b>Quantitate</b>	(Quantifier)Utilisez ce mode pour analyser les données acquises et créer une méthode quantitative afin de générer un tableau de résultats. Le tableau de résultats permet d'examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et des standards internes dans un lot et de consulter les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillon et les tracés métriques.

## AnalystService

AnalystService est le relais de communication entre le spectromètre de masse et les périphériques qui lui sont reliés. AnalystService démarre à chaque fois démarrage du logiciel Analyst MD. AnalystService démarre automatiquement lorsque l'utilisateur se connecte à Windows. S'il n'est pas en cours d'exécution au démarrage du logiciel Analyst MD, AnalystService démarre automatiquement.

### Démarrer AnalystService

Si l'option Startup Type d'AnalystService est définie sur **Manual**, démarrez manuellement AnalystService avant le logiciel Analyst MD. Ne modifiez pas le paramètre **Startup Type**.

1. Ouvrez Administrative Tools.
2. Double-cliquez sur **Services**, puis cliquez sur **AnalystService**.
3. Cliquez sur **Start**.

## Arrêter AnalystService

Arrêtez AnalystService en cas de problèmes de communication avec l'instrument ou de problèmes de communication entre l'instrument et les périphériques.

1. Ouvrez Administrative Tools.
2. Double-cliquez sur **Services**, puis cliquez sur **AnalystService**.
3. Cliquez sur **Stop**.

## Dossiers du projet API Instrument

Ci-après certains des dossiers qui se trouvent dans le projet API Instrument :

- **Bundler** : contient un programme qui étudie tous les aspects d'un fichier de données (fichier wiff) et les combine automatiquement quand l'échantillon est terminé.
- **Configuration** : contient tous les profils matériels (fichiers hwpf).
- **Instrument Data** : contient un fichier appelé `InstrumentData.ins`. Le fichier stocke toutes les informations d'étalonnage essentielles et plus encore.
- **Method Tables** : contient tous les paramètres de l'instrument qui définissent les fonctions de balayage améliorées. Ne modifiez pas les fichiers de ce dossier. La modification du contenu de ce dossier affectera les performances des modes de balayage améliorés.
- **Parameter Settings** : contient tous les paramètres et les liaisons de l'instrument. Les paramètres de l'instrument sont enregistrés dans les fichiers `ParamSettingsdef.psf`.
- **Preferences** : contient le fichier `Tunedata.tun`. Tous les paramétrages (paramètre, réglage, instrument, traitement, apparences et file d'attente) sont enregistrés sous `Tunedata.tun` dans ce dossier.
- **Processing Scripts** : contient les scripts pour le traitement des données en mode Explore. Les scripts se trouvent dans le menu **Script**.
- **Queue Data** : contient les informations de la file d'attente.
- **Tuning Cache** : contient toutes les données créées dans Manual Tuning en cliquant sur **Start** plutôt que sur **Acquire**. Les fichiers sont enregistrés avec un horodatage comme nom. Le dossier Tuning Cache contient un nombre limité de fichiers et écrasera ces derniers si nécessaire. Enregistrez les fichiers sous un nouveau nom et déplacez-les immédiatement s'ils doivent être sauvegardés.

## Fichiers de programme

Les dossiers suivants se trouvent dans le dossier `Program Files\Analyst` du système d'exploitation Windows 7 32 bits ou dans le dossier `Program Files (x86)\Analyst` du système d'exploitation Windows 7 64 bits ou Windows 10 64 bits.

- **bin** : contient les fichiers de programme du logiciel Analyst MD. Le contenu de ce dossier ne doit pas être modifié, car cela affecterait le fonctionnement du logiciel.
- **binEx2** : contient les composants requis pour contrôler les dispositifs ExionLC 2.0.

- **binEx** : contient les composants requis pour contrôler les dispositifs ExionLC, Jasper, Shimadzu LC20/30 contrôlés à l'aide de dispositifs Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller et Shimadzu LC40.
- **Firmware** : contient les fichiers de configuration du microprogramme du système de l'instrument et les fichiers du microprogramme de l'instrument. Pour plus d'informations, consultez le *Guide d'installation du logiciel* livré avec celui-ci.
- **Help** : contient le fichier d'aide en ligne, les guides, les tutoriels, les *notes de version* et le *Guide d'installation du logiciel*.
- **Scripts** : contient les scripts que l'utilisateur peut installer si besoin est. Ces scripts ne sont pas installés automatiquement lors de l'installation du logiciel Analyst MD. Pour plus d'informations, consultez le *Guide de l'utilisateur de scripts*.
- **Simulation** : contient les fichiers de données de l'instrument requis pour exécuter le logiciel en mode Simulation.

## Projets et sous-projets

Décider où stocker les fichiers liés à une expérience avant de la démarrer. Utiliser des projets et des sous-projets pour chaque expérience pour mieux gérer les données et comparer les résultats. Par exemple, les sous-projets peuvent être utilisés pour stocker les résultats pour des dates spécifiques.

---

**Remarque** : Pour utiliser une structure de sous-projets dans un projet, créer au moins un sous-projet lors de la création du projet. Les utilisateurs ne peuvent pas créer de sous-projet dans un projet existant qui n'a pas déjà une structure de sous-projets.

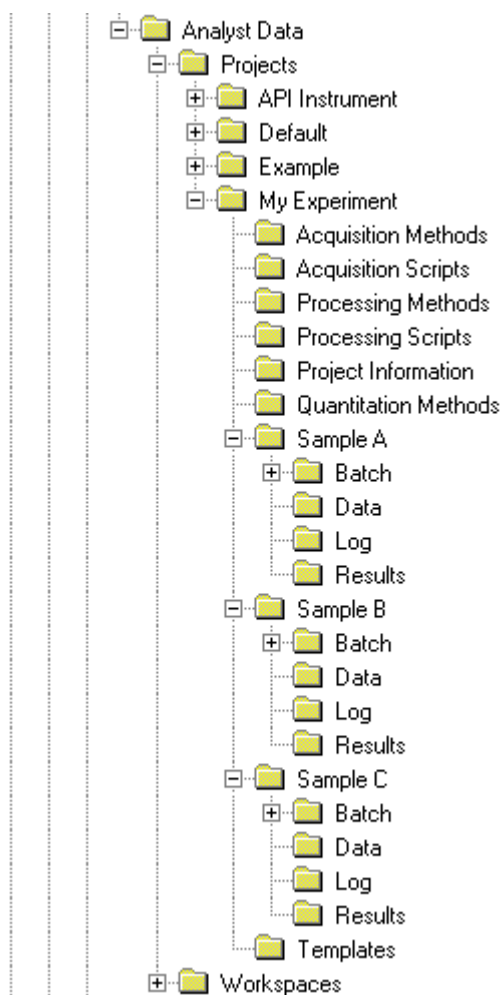
---

## Sous-projets

Un sous-projet contient un sous-ensemble des dossiers contenus dans le projet. Tous les sous-projets doivent contenir les mêmes dossiers. Les sous-projets sont utiles pour organiser les données.

Par exemple, si des échantillons de divers composés issus de différents laboratoires sont analysés avec la même méthode d'acquisition, créez des sous-projets pour stocker les résultats de chaque laboratoire, mais conservez le dossier de la méthode d'acquisition dans le projet. La méthode d'acquisition est alors disponible pour le sous-projet ou le laboratoire. Si les échantillons sont analysés sur une période de plusieurs semaines, les résultats de chaque journée peuvent alors être stockés dans un sous-projet distinct. Consultez la figure suivante.

**Illustration 1-2 : Exemple d'arborescence de projets et de sous-projets**



## Organisation de projet

Un projet est une structure de dossiers conçue pour organiser et stocker les informations sur les échantillons, les données, les informations de quantification et ainsi de suite. Chaque projet contient des dossiers qui peuvent comporter différents types de fichier. Ainsi, le dossier Data contient des fichiers de données d'acquisition. Pour une description du contenu des différents dossiers, consultez le tableau suivant.

Le logiciel ne peut accéder à un projet que si celui-ci est stocké dans un dossier racine. Les utilisateurs ne peuvent pas créer de projets dans un dossier qui n'a pas été défini comme un dossier racine.

Le dossier racine prédéfini est Analyst Data sur le disque où le logiciel est installé. Pour stocker des projets à d'autres emplacements, créez d'autres dossiers racine. Pour plus d'informations sur les dossiers racine, consultez le document *Aide*.

Tableau 1-2 : Dossiers de projet

Dossier	Contenu
\Acquisition Methods	Contient toutes les méthodes d'acquisition disponibles. Les fichiers de méthode d'acquisition portent l'extension dam.
\Acquisition Scripts	Les scripts d'acquisition ne sont pas disponibles avec le logiciel Analyst MD. Ce dossier est vide.  La fonction de script du logiciel Analyst MD, qui permet de créer des scripts personnalisés (séquences d'opérations personnalisées sur Analyst), ne doit pas être utilisée avec un dispositif de diagnostic <i>in vitro</i> . Les contrôles internes réalisés lors de l'utilisation du logiciel Analyst MD ne sont pas réalisés sur des scripts personnalisés et peuvent associer incorrectement des résultats à un ID d'échantillon.
\Batch	Contient tous les fichiers de lot d'acquisition disponibles. Les fichiers de lot d'acquisition portent l'extension dab. Ce dossier contient également un sous-dossier Templates comportant les modèles de lot d'acquisition. Les fichiers de modèle de lot portent l'extension dat.
\Data	Contient les fichiers de données d'acquisition qui portent l'extension wiff.
\Log	Contient les résultats de la quantification et de l'optimisation des composés.
\Processing Methods	Contient toutes les méthodes de traitement des données qualitatives utilisées.
\Processing Scripts	Contient les scripts de traitement des données. Les scripts de traitement stockés dans le projet API Instrument sont affichés dans le menu <b>Scripts</b> .
\Project Information	Contient toutes les informations et tous les paramètres du projet. Ce dossier ne peut pas être stocké dans un sous-projet.
\Quantitation Methods	Contient toutes les méthodes de quantification utilisées qui portent l'extension qmf.
\Results	Contient tous les fichiers de quantification du tableau de résultats qui portent l'extension rdb.
\Templates	Contient les fichiers de modèle de rapport qui portent l'extension rpt.

## Accès et sécurité

Le logiciel Analyst MD travaille avec les composants de sécurité, d'application et d'audit des événements système des Outils d'administration de Windows.

## Informations générales

---

De plus, il intègre de nombreuses fonctions de configuration et de gestion de la sécurité. L'administrateur du logiciel peut :

- choisir un mode de sécurité qui s'adapte au mieux aux besoins de l'environnement d'exploitation,
- ajouter et supprimer des utilisateurs et des rôles,
- définir des droits d'accès pour des utilisateurs et des rôles si nécessaire,
- contrôler l'accès aux spectromètres de masse distants,
- contrôler l'accès aux fichiers de projet.

Pour plus d'informations sur la sécurité du logiciel , consultez le *Guide du directeur de laboratoire* .

---

**Remarque** : Toute modification apportée à la configuration de la sécurité du logiciel prend effet au redémarrage du logiciel .

---


## Espaces de travail

Un espace de travail est un agencement particulier de fenêtres et de volets incluant tous les fichiers associés. Par exemple, tout en travaillant sur un ensemble de données, les utilisateurs peuvent ouvrir et dimensionner différentes fenêtres pour faciliter l'analyse. Cet espace de travail peut être enregistré de sorte que l'agencement des fenêtres soit identique la prochaine fois que les utilisateurs consulteront les données.

Les utilisateurs peuvent personnaliser un espace de travail en sélectionnant les fenêtres et les volets qu'ils souhaitent que chaque espace de travail contienne. Ils peuvent modifier la taille et la position des fenêtres et volets, verrouiller les volets ensemble et masquer ou afficher certains volets et fenêtres. Ainsi, ils peuvent personnaliser un espace de travail pour l'adapter aux tâches à accomplir.

Dans les modes Quantitate et Explore, les utilisateurs peuvent avoir plusieurs espaces de travail par session. L'utilisateur peut enregistrer un espace de travail qui inclut aussi les données associées. Dans l'un de ces modes, un espace de travail peut être ouvert sans quitter ce mode. Pour réutiliser un agencement particulier de fenêtres et de volets avec d'autres ensembles de données, l'utilisateur peut enregistrer un espace de travail comme modèle. Dans le mode Tune and Calibrate ou Acquire, le logiciel enregistre l'espace de travail automatiquement.



Pour faire ceci	Procédez comme suit
Créer un espace de travail	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dans la barre de navigation, cliquez sur le mode dans lequel l'espace de travail a été créé.</li> <li>2. Ouvrez les fenêtres et volets à inclure dans l'espace de travail, puis agencez-les à l'écran, en verrouillant les fenêtres ensemble et en redimensionnant les fenêtres et volets de manière appropriée.</li> <li>3. Cliquez sur <b>File &gt; Save Workspace</b>.</li> <li>4. Dans le champ <b>File name</b>, saisissez le nom de fichier de l'espace de travail.</li> </ol> <hr/> <p><b>Remarque :</b> Le nom de fichier et le chemin d'accès ne peuvent pas dépasser 255 caractères. Le nom de l'espace de travail est suivi d'un point et de l'extension wws pour indiquer qu'il s'agit d'un fichier de poste de travail.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> <li>5. Cliquez sur <b>Save</b>.</li> </ol> <p>Les informations de l'espace de travail sont enregistrées dans un fichier WWS dans le répertoire spécifié.</p>
Ouvrir un espace de travail	<p>Dans les modes Quantitate et Explore, vous pouvez ouvrir différents espaces de travail sans quitter le mode courant.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Cliquez sur <b>File &gt; Open Workspace</b>.</li> <li>2. Sélectionnez le fichier d'espace de travail approprié dans la liste, puis cliquez sur <b>OK</b>.</li> </ol>
Enregistrer un espace de travail	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. En mode Quantitate ou Explore, vérifiez que l'espace de travail est actif.</li> <li>2. Cliquez sur <b>File &gt; Save Workspace As</b>.</li> </ol> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Cliquez sur <b>Save Workspace</b> pour enregistrer l'espace de travail sous le nom de fichier et dans le dossier choisis.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> <li>3. Saisissez le nom de l'espace de travail, puis cliquez sur <b>Save</b>.</li> </ol> <p>Le logiciel enregistre les informations des fenêtres et volets de l'espace de travail associé au mode courant. Dans le mode Configure, Tune and Calibrate ou Acquire, le logiciel enregistre automatiquement l'espace de travail lorsque l'utilisateur quitte le mode courant.</p>
Verrouiller le logiciel	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Dans la barre d'outils, cliquez <b>Lock Application</b> .</li> </ol>

Le réglage et l'étalonnage du spectromètre de masse optimisent les performances de résolution et d'intensité.

Les tâches suivantes sont possibles pendant le réglage :

- Régler les valeurs de décalage de la résolution afin de régler l'intensité et la résolution des masses étalons (pour le mode quadripolaire uniquement).
- Sélectionner les masses à calibrer. Au besoin, des masses peuvent être ajoutées et supprimées de la liste d'étalonnage.
- Créez un ou plusieurs ensembles de standards d'étalonnage uniques. Un ensemble de standards d'étalonnage doit comporter au moins deux composés pour les extrémités haute et basse de la plage de masses concernée.

Un instrument réglé et étalonné peut détecter la résolution de pic spécifié et la masse de l'échantillon. Ceci est possible avec un standard d'étalonnage connu, comme le PPG (polypropylène glycol). Un standard d'étalonnage permet d'étalonner l'échelle de masse pour détecter les ions cibles aussi proches que possible de leur rapport masse-charge, avec un écart de masse acceptable. En plus d'identifier le pic exact, les utilisateurs peuvent régler la résolution pour obtenir la largeur et la forme de pic optimale.

Un spectromètre de masse réglé et étalonné offre le meilleur résultat pour un échantillon ou un composé analysé dans le spectromètre de masse. Le réglage et l'étalonnage sont effectués en même temps, indépendamment de l'optimisation. Le réglage et l'étalonnage se concentrent sur la résolution et l'étalonnage de la masse. L'optimisation se focalise sur la sensibilité.

Les modifications apportées à la configuration du spectromètre de masse lors du réglage et de l'étalonnage sont enregistrées dans les fichiers de données situés dans le dossier API Instrument. Les paramètres prédéfinis dans le dossier de méthode API Instrument doivent être utilisés, car ils ont été optimisés par le technicien de service (FSE) SCIEX.

Après le réglage et l'étalonnage, les performances du système sont optimisées et les paramètres spécifiés deviennent les paramètres par défaut de toutes les expériences. Les utilisateurs peuvent effectuer des expériences avec des paramètres optimisés, indépendants de la source et des composés, pour optimiser la réponse d'un analyte.

---

**Conseil !** Nettoyez la zone Q0 régulièrement afin de limiter l'impact de l'électrisation (perte importante de sensibilité des ions d'intérêt sur une courte durée) sur les quadripôles. Consultez le *Guide du responsable de la maintenance*.

---

Les utilisateurs peuvent ajuster et étalonner l'instrument automatiquement ou manuellement.

**Réglage automatique :** le logiciel effectue l'optimisation de la résolution et l'étalonnage de masse à l'aide de l'assistant Instrument Optimization. Pour les instruments à piège à ions linéaire (LIT), des optimisations MS<sup>3</sup> sont également effectuées.

**Réglage manuel** : les utilisateurs peuvent effectuer la plupart des optimisations de résolution et des étalonnages de l'instrument manuellement.

## Réglage

Le réglage de l'instrument consiste à optimiser la résolution et les paramètres de l'instrument, pour obtenir la meilleure sensibilité et les meilleures performances du spectromètre de masse. Réglez et étalonnez le spectromètre de masse régulièrement ou en cas de dégradation de ses performances. Optimisez le spectromètre de masse pour maximiser la réponse d'un nouvel échantillon ou composé. L'optimisation de la résolution comporte le réglage de la largeur et de la forme des pics.

## Étalonnage

L'étalonnage de masse est le processus consistant à attribuer les rapports masse/charge ( $m/z$ ) corrects aux pics de masse. En effectuant un étalonnage de masse avec un standard comme le polypropylène glycol (PPG), il est possible de comparer les résultats avec un étalonnage précédent afin d'évaluer la proximité des valeurs  $m/z$  des pics observés avec les valeurs théoriques. L'étalonnage précédent peut être mis à jour ou, plus généralement, remplacé par le nouvel étalonnage.

Sélectionnez plusieurs masses lors de l'étalonnage des balayages de Q1, de Q3 et de tous les balayages LIT pour chaque polarité. Les résultats sont enregistrés dans un tableau d'étalonnage. Après un étalonnage de masse, le tableau d'étalonnage est mis à jour avec les valeurs DAC (convertisseur numérique-analogique) du nouvel étalonnage ou des masses figurant déjà dans le tableau d'étalonnage. Toutes les données des masses non calibrées dans l'étalonnage actuel sont conservées. Si l'étalonnage de masse est remplacé, toutes les valeurs de masse de l'étalonnage précédent sont modifiées. Effectuez un étalonnage de masse à l'aide d'un nouveau spectre acquis ou utilisez un spectre issu d'un fichier de données stocké.

## Réglage et étalonnage automatiques

Instrument Optimization est un logiciel d'ajustement automatique d'instrument qui ajuste les modes quadripôle et LIT, et procède à l'étalonnage de masse. Pour le mode quadripôle, il règle les décalages de résolution. Pour le mode LIT, il optimise AF3 et EXB. Pour MS<sup>3</sup>, il ajuste les coefficients d'excitation et d'isolement. Sélectionner l'une des options de performance d'instrument suivantes :

- **Verify instrument performance** : teste les performances de l'instrument, mais laisse les réglages de l'instrument inchangés. Un rapport est généré à la fin du test. Utiliser cette option sur une base hebdomadaire pour vérifier les performances de l'instrument.
- **Adjust mass calibration only** : vérifie et ajuste automatiquement l'étalonnage de masse. Si l'étalonnage de masse a changé, le logiciel le corrige. Utiliser cette option sur une base hebdomadaire pour les instruments LIT ou sur une base mensuelle pour vérifier et ajuster l'étalonnage de masse, le cas échéant.
- **Adjust instrument settings** : vérifie et ajuste les réglages de l'instrument et l'étalonnage de masse. Les réglages actuels de l'instrument sont mis à jour vers des réglages optimaux. Utiliser cette option si les performances de l'instrument sont faibles ou si

la forme du pic est mauvaise. Seuls les utilisateurs expérimentés doivent régler les paramètres de l'instrument.

---

**Remarque :** Les anciennes méthodes LIT doivent être mises à jour avec les nouveaux paramètres. Basculer la vitesse LIT dans l'onglet Advanced MS, puis enregistrer la méthode.

---

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings :** réinitialise les valeurs de l'instrument aux valeurs prédéfinies d'usine. Sélectionner cette option si une composante majeure de l'instrument est remplacée ou après la première installation. *Seuls les techniciens de service doivent utiliser cette fonction.*

## (Facultatif) Sauvegarder manuellement les paramètres de l'instrument

Sauvegardez les paramètres actuels de l'instrument au cas où ils devraient être restaurés ultérieurement. L'emplacement prédéfini pour les paramètres d'instrument manuellement sauvegardés est <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.
2. Cliquez sur **File > Backup Instrument Settings**.
3. Saisissez un nom de fichier.
4. Cliquez sur **Save**.

## (Facultatif) Restaurer les paramètres de l'instrument

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.
2. Cliquez sur **File > Restore Instrument Settings File**.
3. Naviguez vers les paramètres de l'instrument à restaurer.
4. Cliquez sur **Open**.

## Compound Optimization

L'assistant logiciel Compound Optimization optimise automatiquement un analyte. Les échantillons peuvent être introduits par la perfusion ou la FIA (analyse par injection en flux continu). Le logiciel vérifie tout d'abord la présence des composés. Les tensions des différents paramètres de trajectoire d'ions augmentent ou diminuent progressivement afin de définir l'intensité maximale du signal (balayage Q1) pour chaque ion. Un fichier texte est généré et affiché au cours du processus d'optimisation. Ce fichier enregistre les diverses expériences exécutées et les valeurs optimales pour chaque paramètre optique de l'ion. Un dossier contenant l'ensemble des expériences réalisées est également généré. Il est

possible d'y accéder en ouvrant le dossier contenant le fichier de données en mode Explore. Pour chaque expérience exécutée, une méthode d'acquisition est également générée et enregistrée dans le dossier de la méthode d'acquisition.

## Analyse par injection en flux continu

L'analyse par injection en flux continu (FIA) consiste à injecter une petite quantité d'échantillon par un auto-échantillonneur dans le courant du LC. Au cours du processus d'optimisation par FIA, des injections d'échantillons multiples sont réalisées pour différents types de paramètres dépendants de la source d'ions ou du composé, ou des deux, modifiés entre les injections. La FIA optimise la défragmentation potentielle, l'énergie de collision et le potentiel de sortie de la cellule de collision par le biais de séries d'expériences en boucle, c'est-à-dire un paramètre dépendant du composé suivi par le paramètre dépendant du composé suivant. Elle optimise les paramètres dépendant de la source d'ions en réalisant une injection pour chaque paramètre.

Utilisez l'optimisation par FIA pour optimiser à la fois les paramètres dépendant du composé et de la source par LC à des débits plus élevés.

## Perfusion

La perfusion est le flux continu d'échantillon à faible débit dans la source d'ions en utilisant une pompe à seringue. Au cours du processus d'optimisation de la perfusion, le logiciel peut sélectionner les ions précurseurs et les ions produits et effectuer, dans les deux cas, une optimisation du potentiel de défragmentation, de l'énergie de collision et du potentiel de sortie de la cellule de collision. Les tensions de ces paramètres de trajectoire d'ions augmentent ou diminuent progressivement afin de déterminer l'intensité maximale du signal pour les ions précurseurs et les ions produits.

Utiliser l'optimisation de la perfusion pour optimiser les paramètres dépendant du composé uniquement à des débits plus faibles que ceux utilisés lors de l'analyse par LC/MS.

## Infusion en T

L'infusion en T (ou infusion divisée) désigne le flux continu de l'échantillon à des vitesses faibles dans la source d'ions via un raccord à trois voies situé sur la source d'ions. Ce raccord à trois voies est connecté à une pompe à seringue par une tubulure PEEK rouge et une pompe LC.

En cas de création d'un fichier de méthode d'acquisition à partir d'un fichier existant, l'utilisateur peut utiliser tout ou partie des méthodes des périphériques dans la méthode d'acquisition. Utilisez Acquisition Method Editor pour personnaliser la méthode d'acquisition en ajoutant ou en supprimant des méthodes des périphériques. Si l'icône du périphérique requis ne figure pas dans le volet Acquisition Method Browser, les utilisateurs peuvent ajouter le périphérique uniquement s'il est inclus dans le profil matériel actif.

Nous recommandons que seuls les utilisateurs compétents en développement de méthode créent ou modifient les méthodes d'acquisition et de quantification. Pour plus d'informations sur les rôles et la sécurité section consultez la section À propos des personnes et des rôles dans le document *Guide du directeur de laboratoire*.

## Dispositifs dans les méthodes d'acquisition

Créez une méthode d'acquisition pour un périphérique en sélectionnant les paramètres de fonctionnement de ce périphérique. Des méthodes d'acquisition peuvent être créées pour tous les périphériques suivants s'ils sont configurés dans le profil matériel actif :

- Pompes
- Auto-échantillonneurs
- Pompes à seringue
- Fours à colonne
- Valves d'inversion
- Détecteur à barrettes de diodes
- Convertisseurs analogique/numérique
- Systèmes intégrés

Pour plus d'informations sur la configuration des propriétés des périphériques, consultez le *Guide d'installation des périphériques*.

---

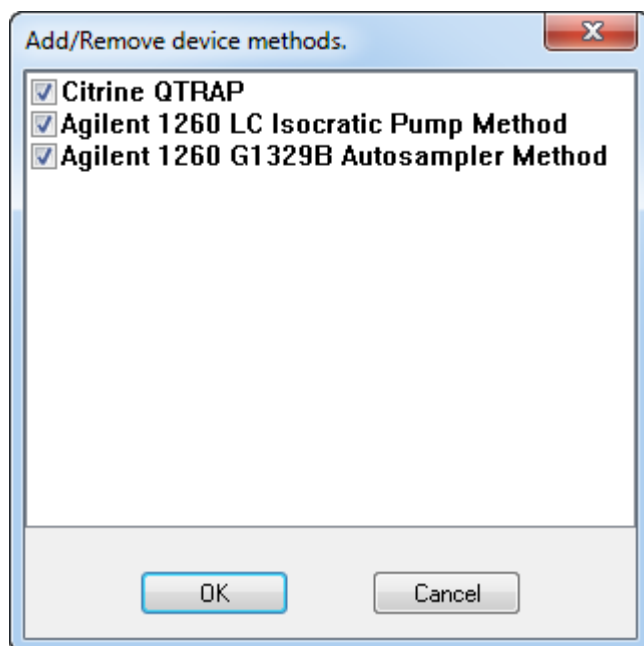
**Remarque :** Les paramètres disponibles pour les périphériques LC varient selon le fabricant.

---

## Ajout ou retrait d'un périphérique

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquer droit sur **Acquisition Method**, puis cliquer sur **Add/Remove Device Method**.  
La boîte de dialogue Add/Remove Device Method s'ouvre, affichant les dispositifs configurés dans le profil matériel actif.

Illustration 3-1 : Boîte de dialogue Add/Remove Device Method



2. Cocher ou décocher les cases près de la méthode de périphérique pour ajouter ou retirer celle-ci.
3. Cliquer sur **OK**.

## Définir les propriétés de la pompe LC

1. Avec un fichier de méthode d'acquisition ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour la pompe Agilent, cliquez sur l'icône **Pump**.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC de système intégré, cliquez sur **Shimadzu LC System**.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC-20/30 de système intégré, les appareils Shimadzu LC 40, les appareils ExionLC, les appareils ExionLC 2.0 ou les appareils Jasper LC, cliquez sur **LC System**.
2. Sélectionnez l'onglet correspondant à la pompe LC dans le volet droit si ce n'est pas déjà fait, puis modifiez les propriétés ou les paramètres selon les besoins.
3. Enregistrez le fichier.

## Définir les propriétés de l'auto-échantillonneur

1. Vérifiez que, dans l'onglet Acquisition Properties, le champ **Synchronization Mode** affiche **LC Sync**. Le dispositif, l'injection de l'échantillon et l'acquisition de l'instrument démarrent simultanément.
2. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, effectuez l'une des opérations suivantes :

## Méthodes d'acquisition

---

- Pour l'auto-échantillonneur Agilent, cliquez sur l'icône Agilent Autosampler.
  - Pour l'auto-échantillonneur CTC Pal, cliquez sur l'icône CTC PAL Autosampler.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC de système intégré, cliquez sur **Shimadzu LC System**.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC-20/30 de système intégré, les appareils Shimadzu LC 40, les appareils ExionLC, les appareils ExionLC 2.0 ou les appareils Jasper LC, cliquez sur **LC System**.
3. Ouvrez l'onglet Autosampler dans le volet droit, puis modifiez les propriétés ou les paramètres selon les besoins.
  4. Enregistrez le fichier.

## Définir les propriétés de la pompe à seringue intégrée

Cette procédure est réservée aux systèmes dotés de pompes à seringue intégrées.

1. Avec un fichier de méthode d'acquisition ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition Method Browser, cliquez sur l'icône Syringe Pump. L'onglet Syringe Pump Method Properties s'affiche dans le volet Acquisition Method Editor.
2. Modifiez les champs selon les besoins.
3. Enregistrez le fichier.

## Définir les propriétés du four à colonne

1. Avec un fichier de méthode d'acquisition ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour le four à colonne Agilent, cliquez sur l'icône correspondant à **Agilent Column Compartment**.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC de système intégré, cliquez sur **Shimadzu LC System**.
  - Pour les appareils Shimadzu LC 20/30 activés avec le contrôleur Shimadzu LC-20/30 de système intégré, les appareils Shimadzu LC 40, les appareils ExionLC, les appareils ExionLC 2.0 ou les appareils Jasper LC, cliquez sur **LC System**.
2. Sélectionnez l'onglet Column Oven dans le volet droit s'il n'est pas déjà sélectionné, puis modifiez les propriétés ou les paramètres selon les besoins.
3. Enregistrez le fichier.

## Définir les propriétés de la vanne d'inversion

La vanne d'inversion peut être utilisée comme une vanne de dérivation ou d'injection. Sélectionnez le mode de synchronisation **Manual Sync with Valve** en cas d'utilisation de la vanne comme injecteur. Sélectionnez n'importe quel autre mode si la vanne est utilisée comme dérivation.



1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur l'icône **Valve**.  
L'onglet Valve Properties s'ouvre dans Acquisition Method Editor.
2. Modifiez les noms de position prédéfinis, si nécessaire.  
La vanne d'inversion est parfois utilisée pour basculer le flux de solvant vers l'évacuation ou vers une colonne différente. Les noms de positions prédéfinis sont A et B.
  - Dans la liste **Change Position Names**, sélectionnez une position.
  - Dans la liste **Change Position Names**, renommez les noms de position prédéfinis en fonction du branchement de la vanne. Si la vanne est utilisée comme injecteur, renommez A et B en Inject et Divert ou en Column et Waste. Si la vanne est utilisée comme vanne de dérivation, renommez les positions prédéfinies A et B en Divert et Inject ou en Waste et Column.
3. Dans la colonne **Total Time (min)**, cliquez sur une cellule, puis saisissez la durée pendant laquelle la vanne restera dans cette position.
4. Dans la colonne **Position**, cliquez sur une cellule, puis dans la liste **Position**, sélectionnez la position de la vanne.
5. Répétez les étapes 3 et 4 pour chaque changement de vanne requis durant l'acquisition.
6. Enregistrez le fichier.

## Définir les paramètres du détecteur à barrettes de diodes (Agilent)

1. Avec un fichier de méthode d'acquisition ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur l'icône Agilent Diode Array Detector.  
L'onglet Agilent DAD Method Editor s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.
2. Modifiez les propriétés selon les besoins.
3. Enregistrez le fichier.

## Définir les propriétés du convertisseur analogique/numérique

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur l'icône Analog to Digital Converter (ADC).  
L'onglet Analog/Digital Converter Properties s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.
2. Dans la section Sample, dans le champ **Rate (pts/sec)**, saisissez le débit.

---

**Remarque :** L'intervalle et le débit sont proportionnels. Lorsque le débit est modifié, le logiciel calcule automatiquement à nouveau l'intervalle.

---

3. Pour définir les détails du canal, procédez comme suit :
  - a. Dans le champ **Channels**, cliquez sur le nom du canal, puis cochez la case en regard du nom pour l'inclure dans la méthode.

- b. Dans le champ **Interpreted Value @ Full Scale**, saisissez la valeur appropriée.
- c. Dans le champ **Interpreted Unit**, saisissez l'unité appropriée.

Le nombre de canaux disponibles est indiqué lors du paramétrage du convertisseur analogique-numérique dans le profil matériel.

- 4. Enregistrez le fichier.

## Dynamic Fill Time

Dynamic Fill Time est une fonction conçue spécialement pour optimiser les données obtenues dans chaque spectre pour les fonctions de piège à ions linéaire (LIT). DFT adapte automatiquement la durée de remplissage utilisée pour remplir le piège à ions en fonction du flux d'ions provenant de la source. Pour des ions plus intenses, la durée de remplissage est automatiquement réduite de façon à garantir que le piège ne soit pas trop rempli d'ions.

Pour des ions moins intenses, la durée de remplissage est automatiquement augmentée de façon à obtenir de bonnes statistiques sur les ions dans le spectre. La fonction DFT s'applique à tous les types de balayage suivants :

- MS amélioré (EMS)
- Résolution améliorée (ER)
- Ion produit amélioré (EPI)
- MS/MS/MS (MS<sup>3</sup>)

Réglez les paramètres DFT en sélectionnant **Tools > Settings > Method Options** dans le logiciel.

## Expériences et périodes

La méthode d'acquisition du spectromètre de masse se compose d'expériences et de périodes. Dans le volet Acquisition Method Browser, créez une séquence de périodes d'acquisition et d'expériences pour le spectromètre de masse. Sinon, ouvrez une méthode déjà créée dans Tune Method Editor.

### Expériences

Une expérience comporte les paramètres du spectromètre de masse et le type de balayage pendant un balayage MS. Un ensemble de balayages MS réalisés pendant une durée spécifique est appelé une période. Une méthode d'acquisition dans laquelle les paramètres et les actions MS sont les mêmes pendant toute sa durée est appelée méthode à une seule période et une seule expérience.

Dans les expériences en boucle, les paramètres MS sont modifiés balayage par balayage. Par exemple, si l'échantillon contient deux composés, A et B, les utilisateurs pourraient vouloir boucler une expérience MS/MS du composé A avec une expérience MS/MS du composé B pour obtenir des informations sur les deux composés au cours de la même analyse. La méthode du spectromètre de masse alternera entre les deux types de balayage. D'autres exemples d'expériences en boucle incluent l'alternance entre les modes positif et

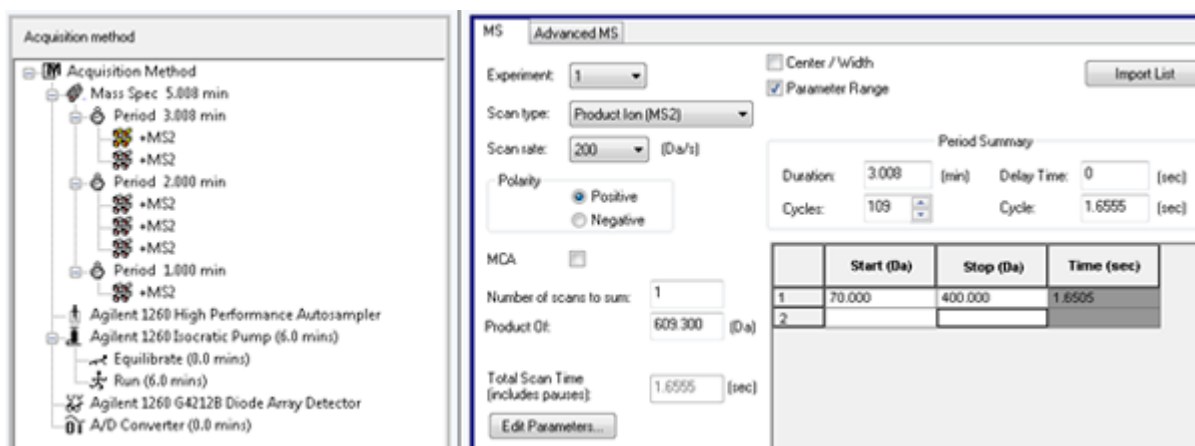
négatif au cours d'une analyse et les méthodes d'acquisition dépendante de l'information (IDA).

## Périodes

Une période peut contenir une ou plusieurs expériences en boucle. Dans une méthode d'acquisition à périodes multiples, les expériences sont effectuées pendant une durée spécifiée, puis le logiciel passe à un autre ensemble d'expériences. Les périodes sont utiles quand le temps d'élution des composés au cours d'une analyse LC est connu. Le spectromètre de masse peut réaliser différentes expériences en fonction du moment où les composés sont élués pour obtenir autant d'informations que possible au cours de la même analyse.

La figure suivante affiche une méthode à trois périodes.

**Illustration 3-2 : Exemple d'expérience à périodes multiples**



## Méthodes IDA (Information Dependent Acquisition)

Une méthode IDA réalise automatiquement des expériences en fonction des résultats obtenus lors des cycles précédents. Utilisez les critères IDA pour optimiser les paramètres d'acquisition de données tout en acquérant des données pour réduire la durée d'acquisition de l'échantillon en une seule injection. Avec IDA, les utilisateurs peuvent à la fois conserver la quantité d'échantillon requise et économiser un temps de travail précieux.

Créez une méthode IDA avec deux balayages d'exploration au maximum et des balayages dépendants pour un maximum de huit pics les plus intenses dans une seule période. Un balayage d'exploration est utilisé dans la méthode IDA pour déclencher des expériences supplémentaires. Les types de balayage suivants peuvent être utilisés comme balayage d'exploration :

- Ion produit amélioré (EPI) (balayage d'exploration de second niveau)
- MS amélioré (EMS)
- Algorithme MRM (Multiple Reaction Monitoring) ou *Scheduled* MRM

## Méthodes d'acquisition

---

- Perte neutre (NL)
- Ions précurseurs (Prec)
- Q3 MS

Les types de balayage suivants peuvent être utilisés comme balayages dépendants :

- EPI
- MS/MS

Lors d'une acquisition par la méthode IDA, les actions du spectromètre de masse diffèrent d'un balayage à l'autre en fonction des données acquises lors d'un cycle précédent. Le logiciel analyse les données au fur et à mesure de leur acquisition, puis détermine les masses sur lesquelles réaliser des balayages dépendants. Les utilisateurs peuvent définir les critères d'activation d'une expérience IDA ainsi que les paramètres de la méthode à utiliser.

L'acquisition par la méthode IDA améliore les résultats en exécutant des balayages dépendants en fonction des critères suivants définis par l'utilisateur :

- Intensité ionique et état de la charge
- Listes d'inclusion et d'exclusion
- Motif isotopique
- Exclusion dynamique
- Taux de variation de l'intensité ionique (consultez la section [Algorithme Dynamic Background Subtraction](#).)

## Scheduled Ionization

La fonctionnalité Scheduled Ionization permet de réduire le temps d'immobilisation du spectromètre de masse en réduisant le risque de contamination. Elle est disponible dans Acquisition Method Editor et permet d'acquérir des lots avec une méthode d'acquisition mono-période. Consultez la figure suivante.

Illustration 3-3 : Fonctionnalité Schedule Ionization dans Acquisition Method Editor

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

Total Scan Time (includes pauses): 0.0000 (sec)

Edit Parameters...

☒ DMS Off

☒ Ramp COV

Start: -30.000 Stop: 30.000 Step: 0.100

Scheduled MRM

☐ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

Import List

Period Summary

Duration: 0.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 600 Cycle: 0.0000 (sec)

☒ Scheduled Ionization

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

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

Si vous sélectionnez **Scheduled Ionization** et que les paramètres **Start Time** et **Stop Time** de **Scheduled Ionization** sont définis, le champ **IonSpray Voltage (ISV)** ne prend la valeur **ISV** spécifiée dans la méthode d'acquisition qu'entre les valeurs **Start Time** et **Stop Time** où les pics d'intérêt s'éluent. **ISV** a pour valeur 0 avant le paramètre **Start time** et après le paramètre **Stop time**. La méthode LC doit être configurée normalement. Par exemple, si la durée LC est fixée à 5 min et que **Scheduled Ionization** commence à 1,5 min et s'arrête à 3,5 min, la LC commence à 0 min et s'arrête à 5 min, tandis que la collecte des données du spectromètre de masse commence à 1,5 min et s'arrête à 3,5 min. **Scheduled Ionization** peut être utilisée pour **Nebulizer Current (NC)** et avec une source d'ions Turbo V ou IonDrive Turbo V en mode APCI.

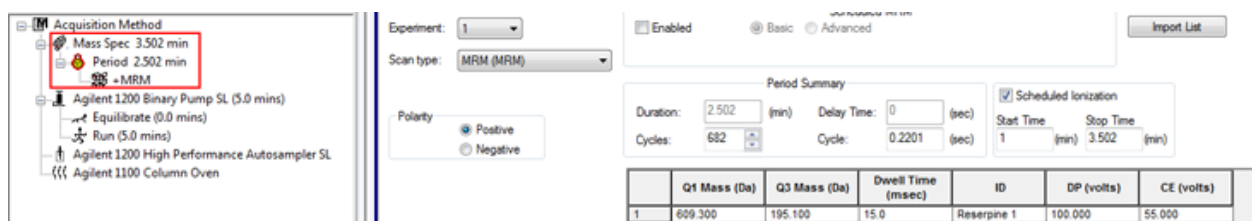
Les paramètres **Start Time** et **Stop Time** d'une méthode d'acquisition avec la fonctionnalité **Scheduled Ionization** doivent être configurés en fonction des données acquises avec la même méthode d'acquisition, mais sans la fonctionnalité **Scheduled Ionization**.

**Remarque :** La valeur de **Stop Time** doit être postérieure à celle de **Start Time**.

## Méthodes d'acquisition

**Remarque :** Si la case **Scheduled Ionization** est cochée, l'heure **Mass Spec** est identique à l'heure **Stop Time**, qui correspond au moment où l'ionisation est programmée pour s'arrêter. L'heure affichée en regard de **Period** dans Acquisition Method Editor est la valeur indiquée dans le champ **Duration**. Consultez la figure suivante.

**Illustration 3-4 : Heure du spectromètre de masse avec la fonctionnalité Scheduled Ionization sélectionnée**



## Valeurs de compressibilité des solvants

**Tableau 3-1 : Valeurs de compressibilité des solvants**

Solvant	Compressibilité (10 <sup>-6</sup> /bar)
Acétone	126
Acétonitrile	115
Benzène	95
Tétrachlorure de carbone	110
Chloroforme	100
Cyclohexane	118
Éthanol	114
Acétate d'éthyle	104
Heptane	120
Hexane	150
Isobutanol	100
Isopropanol	100
Méthanol	120
1-Propanol	100
Toluène	87
Eau	46

## Taille de la seringue versus débit

Le débit de la pompe à seringue dépend de la seringue installée dans la pompe. Les tableaux suivants indiquent la relation entre le débit et la taille de la seringue.

**Tableau 3-2 : Taille de la seringue et débit en l/h**

Taille de la seringue (µL)	l/h minimum	l/h maximum
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	1 193,0

**Tableau 3-3 : Taille de la seringue et débit en µl/min**

Taille de la seringue (µL)	µl/min minimum	µl/min maximum
50	0,002	39,7
100	0,005	79,7
250	0,012	197,8
500	0,024	397,0
1000	0,048	795,0
1,0	0,049	805,0

**Tableau 3-4 : Taille de la seringue et débit en ml/h**

Taille de la seringue (ml)	ml/h minimum	ml/h maximum
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	1 208,0

**Tableau 3-5 : Taille de la seringue et débit en ml/min**

Taille de la seringue (ml)	ml/min minimum	ml/min maximum
50,0	0,002	28,40
100,0	0,003	47,60
140,0	0,004	55,10



Un lot est un ensemble d'informations sur les échantillons à analyser. En général, les échantillons sont regroupés en lots pour simplifier l'envoi. Le regroupement des échantillons dans un ensemble réduit également la quantité de données qui doivent être inscrites manuellement. Un ensemble peut être constitué d'un ou de plusieurs échantillons. Tous les ensembles d'un lot utilisent le même profil matériel. Cependant, les échantillons d'un ensemble peuvent avoir des méthodes d'acquisition différentes. Un lot ne peut être envoyé que depuis un poste d'acquisition.

Les lots incluent les informations suivantes :

- Informations sur l'échantillon (nom, ID, nom du fichier de données et commentaire)
- Position de l'auto-échantillonneur (information sur le carrousel), position des flacons
- Méthodes d'acquisition et volume d'injection
- Méthode de quantification (facultatif)
- Informations de quantification (facultatif)
- Données personnalisées sur l'échantillon (facultatif)
- Informations sur l'ensemble

## Éditeur de lots

Utilisez Batch Editor pour créer ou modifier des lots et pour créer des modèles de lot. Pour analyser des échantillons, chacun à l'aide d'une méthode d'acquisition différente, sélectionnez plusieurs méthodes d'acquisition dans le même ensemble.

Une méthode d'acquisition peut également être utilisée comme modèle. Dans ce cas, la même méthode est utilisée pour chaque échantillon, mais l'utilisateur peut sélectionner différentes masses ou plages de masses pour chaque échantillon. Batch Editor peut également être utilisé pour importer des listes d'échantillons créées dans des programmes externes comme Microsoft Excel.

L'utilisateur peut modifier chaque détail du lot avant de l'envoyer pour traitement. Lorsqu'un lot est envoyé en analyse, l'utilisateur peut l'envoyer en totalité, envoyer certains ensembles du lot ou certains échantillons d'un ensemble.

Par exemple, pour analyser dix échantillons, cinq avec une méthode d'acquisition et cinq avec une méthode d'acquisition différente, créez un lot de deux ensembles, un pour chaque méthode utilisée.

---

**Remarque :** Nous recommandons aux utilisateurs d'examiner tous les paramètres du lot avant de l'envoyer afin de vérifier que les positions du carrousel, de la plaque et du flacon correspondent aux paramètres matériels de l'auto-échantillonneur, que l'option de paramétrage du carrousel Specify rack est disponible dans la méthode d'acquisition et qu'elle est sélectionnée pour l'auto-échantillonneur utilisé.

---

**Remarque :** Nous recommandons aux utilisateurs de vérifier que le carrousel et la plaque adéquats avec des emplacements d'échantillon corrects sont chargés dans l'auto-échantillonneur avant d'envoyer le lot.

---

**Tableau 4-1 : Onglets de Batch Editor**

Onglet	Description
Sample	Utilisé pour créer la liste des échantillons et pour sélectionner les détails d'un échantillon comme son nom et la méthode d'acquisition utilisée pour l'acquérir.
Locations	Utilisé pour sélectionner les positions des échantillons dans l'auto-échantillonneur. Les emplacements des échantillons peuvent être spécifiés numériquement dans l'onglet Sample. Cependant, l'onglet Locations fournit une interface graphique pour sélectionner les emplacements des échantillons.
Quantitation	Permet de sélectionner les types et les concentrations des échantillons pour les lots de quantification. Comme les informations de quantification peuvent être spécifiées après l'acquisition dans le tableau de résultats de quantification, les utilisateurs ne doivent pas utiliser l'onglet Quantitation de Batch Editor. L'assistant Quantication peut être utilisé à la place.
Submit	Permet de vérifier les informations de l'échantillon et d'envoyer les échantillons dans la file d'attente d'acquisition. Queue Manager montre l'état de la file d'attente, des lots et des échantillons, et permet aux utilisateurs de gérer les échantillons dans la file d'attente.

## Importer des fichiers de lot

Il est possible d'importer un fichier texte contenant les informations du lot au lieu de créer un lot dans Batch Editor. Si tous les détails de l'échantillon se trouvent dans un tableur, il est plus rapide de réorganiser et d'importer ces données dans le tableur que de les saisir manuellement dans Batch Editor.

Avant d'importer les informations du lot depuis un fichier texte, vérifiez que les données contenues dans ce fichier sont organisées et formatées correctement. En particulier, les en-têtes de colonne de la feuille de calcul doivent correspondre aux en-têtes de colonne de Batch Editor. Pour vous assurer que le fichier texte contient les en-têtes adéquats, créez un lot à l'aide de Batch Editor, exportez-le au format texte, saisissez les valeurs appropriées dans un tableur, puis réimportez le fichier dans Batch Editor.

Pour des exemples de fichiers correctement mis en forme, consultez le dossier Batch du projet Example.

Les informations d'un fichier de lot peuvent également être exportées puis utilisées par d'autres applications, comme Microsoft Excel, Microsoft Access et certains logiciels de système de gestion d'informations de laboratoire LIMS.

## Définir les détails de quantification dans l'éditeur de lots (facultatif)

Si une méthode de quantification est utilisée avec un lot et que l'utilisateur ne veut pas sélectionner les détails de quantification après l'acquisition, les détails de quantification (type d'échantillon, concentration de l'échantillon) doivent être définis avant l'envoi du lot.

Les colonnes **Internal Standard** et **Standard** appropriées s'affichent dans l'onglet Quantitation, selon la méthode de quantification sélectionnée dans l'onglet Sample.

1. Avec un fichier de lot ouvert dans la fenêtre Batch Editor, cliquez sur l'onglet Quantitation.
2. Sélectionnez l'ensemble contenant les échantillons.
3. Sélectionnez une option dans les champs **Quant Type**, **Dilution Factor** et **Weight/Volume** pour tous les échantillons de la liste dans la cellule.
4. (Au besoin) Dans la colonne **Analyte**, saisissez la concentration d'analytes.
5. (Au besoin) Dans la colonne **Internal Standard**, saisissez la concentration de standards internes.
6. Répétez cette procédure pour chaque ensemble du lot.

# Analyse des données qualitatives 5

---

Les utilisateurs peuvent afficher les informations contenues dans un fichier de données sous forme de tableau ou de graphique. Les données graphiques sont présentées sous forme de chromatogramme ou de spectre. Les données dans l'un ou l'autre de ces formats peuvent être affichées sous forme de tableau de points de données et plusieurs opérations de tri sont possibles sur les données.

Le logiciel stocke les données du TIC et de la méthode dans des fichiers wiff, et les données spectrales dans des fichiers wiff.scan. Il a besoin des fichiers wiff et wiff.scan pour ouvrir le fichier de données. De plus, il peut ouvrir les fichiers txt qui contiennent les données d'un seul échantillon. Lorsqu'un fichier de données est ouvert dans le logiciel, plusieurs volets s'affichent selon le type d'expérience réalisée.

Si la case MCA est cochée dans Tune Method Editor, le fichier de données ouvre un spectre de masse. Si la case MCA n'est pas cochée, le fichier de données ouvre un chromatogramme en courant ionique total (TIC). Les utilisateurs peuvent sélectionner une plage, puis double-cliquer dans le volet TIC à un moment donné pour afficher le spectre correspondant à cette plage.

## Chromatogrammes

Un chromatogramme montre la variation d'une certaine quantité en fonction du temps au cours d'une expérience répétitive. Par exemple, quand le spectromètre de masse est programmé pour répéter à plusieurs reprises un ensemble donné de balayages spectraux. Les données chromatographiques sont contiguës, même si leur intensité est nulle. Les chromatogrammes ne sont pas générés directement par le spectromètre de masse, mais à partir des spectres.

Dans la vue du chromatogramme, l'intensité en comptages par seconde (cps) s'affiche sur l'axe des ordonnées, avec le temps en abscisse. Les pics sont automatiquement marqués.

Dans le cas de la LC/MS, le chromatogramme est souvent présenté comme une fonction du temps, le moment auquel un balayage particulier a été obtenu, qui peut être dérivé du nombre de balayages.

Un chromatogramme donne une vue globale des données (généralement dépendant du temps si l'utilisateur utilise une colonne LC), mais ne transmet aucune information sur les composants d'un pic. Par exemple, si un chromatogramme n'affiche qu'un seul pic, celui-ci peut représenter plusieurs composés, c'est-à-dire différentes masses.

Les données chromatographiques peuvent changer en temps et en intensité si les conditions chromatographiques d'un échantillon donné évoluent.

## Spectres

Un spectre désigne les données obtenues directement à partir du spectromètre de masse et représente normalement le nombre d'ions détectés avec des rapports masse/charge ( $m/z$ )

donnés. Il s'affiche sous forme de graphique avec les rapports  $m/z$  sur l'axe des abscisses et l'intensité (cps) représentée sur l'axe des ordonnées.

En ce qui concerne les spectres MRM, l'intensité est associée à deux masses, la masse de l'ion précurseur (Q1) et la ou les masses de l'ion produit (Q3).

Lorsque les données sont visualisées sous forme de spectre, des informations spécifiques de la masse concernant un composé sont obtenues. Un spectre présente les valeurs  $m/z$  pour les ions correspondant à un pic chromatographique donné. Ces ions peuvent être utilisés pour trouver des informations plus spécifiques. Par exemple, un spectre illustre toutes les masses constituant un pic, notamment l'intensité de chaque masse.

L'intensité spectrale peut changer, mais la valeur  $m/z$  est fixe parce que la masse d'un composé ne varie pas.

Il existe deux façons de générer des données spectrales :

- Si un seul balayage est acquis ou si MCA est utilisé pour l'acquisition, les données sont alors affichées sous la forme d'un spectre.
- À partir d'un chromatogramme.

## Soustraction du bruit de fond

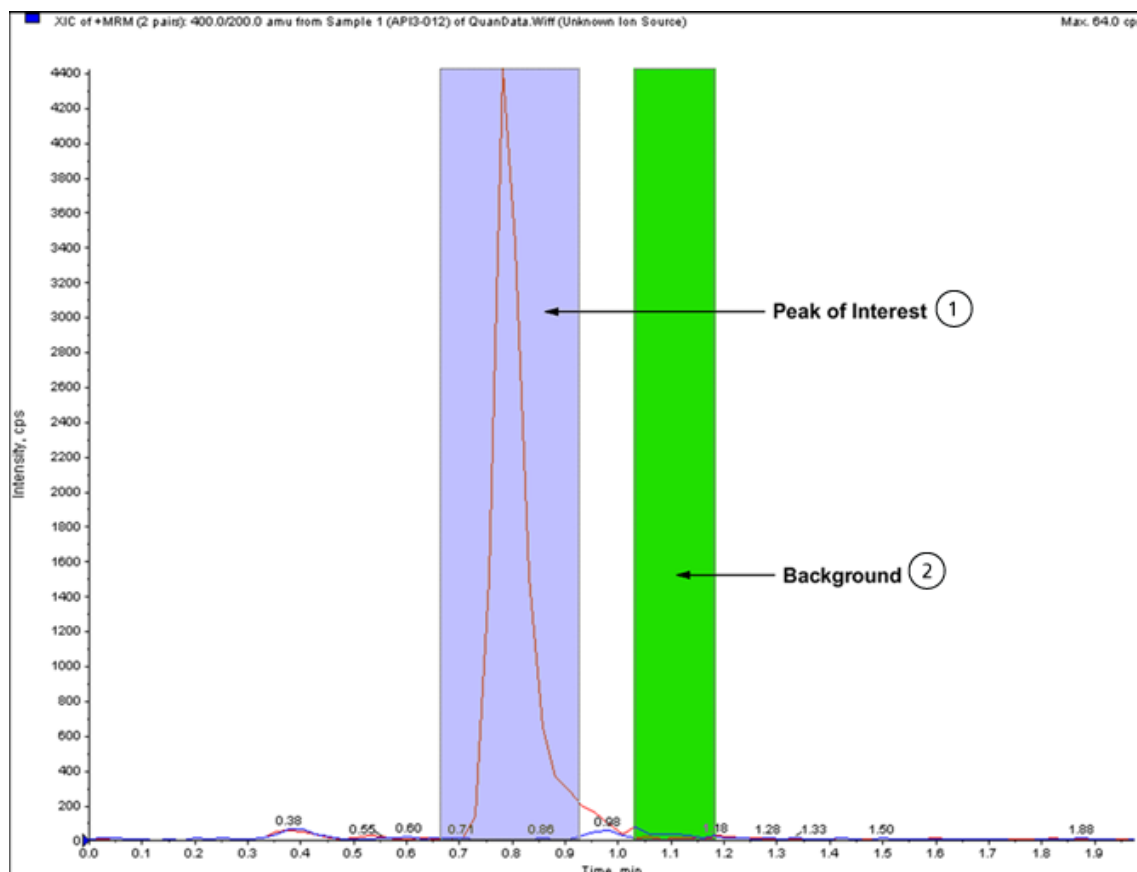
La soustraction du bruit de fond réduit la quantité de bruit dans un spectre en soustrayant une ou deux plages contenant du bruit d'une plage qui contient un pic. Les utilisateurs peuvent déplacer les plages indépendamment ou les verrouiller et les déplacer comme une seule entité dans le graphique pour optimiser l'isolement du pic ou pour isoler un autre pic. Locked Background Subtract est le paramètre prédéfini. Le logiciel propose différentes méthodes pour effectuer une soustraction de bruit de fond.

**Soustraction du bruit de fond :** les utilisateurs peuvent utiliser la soustraction du bruit de fond pour isoler un pic d'intérêt. Les utilisateurs peuvent mettre en surbrillance et soustraire jusqu'à deux plages sélectionnées du pic. Les utilisateurs peuvent également verrouiller les plages et les déplacer à l'intérieur du graphique pour optimiser l'isolement du pic ou pour isoler un autre pic.

## Effectuer une soustraction du bruit de fond pour un chromatogramme

1. Ouvrez un fichier de données.
2. Sélectionnez une plage de bruit de fond dans le chromatogramme.
3. Appuyez sur **Shift**, puis sélectionnez une autre plage de bruit de fond.

Illustration 5-1 : XIC



Élément	Description
1	Pic d'intérêt
2	Bruit de fond

4. Pour définir la plage de soustraction, cliquez sur **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**.
5. Sélectionnez le pic d'intérêt.
6. Cliquez sur **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**. Le bruit de fond est soustrait du pic et un nouveau spectre est généré.
7. Pour isoler un autre pic, faites glisser les plages verrouillées dans le chromatogramme et répétez la soustraction du bruit de fond.

**Conseil !** Pour effacer la zone de soustraction du bruit de fond, cliquez sur **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

8. Pour enregistrer le spectre après soustraction du bruit de fond en tant que fichier de données traitées, cliquez sur **File > Save Processed Data File**.

## Déverrouiller les plages

Prérequis
<ul style="list-style-type: none"><li>La plage de soustraction sélectionnée est verrouillée.</li></ul>



Cliquez sur **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked.**

Les plages sont déverrouillées et chacune d'elles peut être déplacée indépendamment.

## Soustraction de la ligne de base

Baseline Subtract élimine un décalage constant ou variant lentement d'un ensemble de données. Ceci est utile pour localiser les petits pics qui sont masqués par le bruit. Le logiciel utilise l'algorithme suivant pour effectuer une soustraction de la ligne de base.

- Chaque point de données de l'ensemble est considéré comme le centre d'une fenêtre (en masse ou en temps) dont la largeur, définissable par l'utilisateur, est mesurée en uma ou en minutes.
- Les valeurs minima de chaque côté du point de données actuel (minima) à l'intérieur de la fenêtre sont détectées.
- Une ligne droite est tracée entre les deux minima et la hauteur (intensité) du point de données actuel au-dessus de la ligne est calculée. Les points terminaux des données sont considérés comme des minima.
- Le point de données est remplacé par la nouvelle valeur calculée.

## Calculateurs

Utilisez un calculateur pour effectuer des calculs en fonction des données recueillies. Bien que le calculateur se trouve dans une fenêtre distincte, il est connecté au graphique actif dans le logiciel.

Les calculateurs suivants sont disponibles :

- [Calculateur Elemental Composition](#)
- [Calculateur Hypermass](#)
- [Calculateur Elemental Targeting](#)
- [Calculateur Mass Property](#)
- [Calculateur Isotopic Distribution](#)

Les utilisateurs peuvent couper et coller des données d'une zone de texte vers une autre entre les différentes fenêtres des calculateurs. Pour imprimer les données de l'un des calculateurs, cliquez sur l'icône **Print** dans le coin supérieur gauche de la fenêtre. Pour plus d'informations sur les calculateurs, consultez l'aide.

Les données issues des calculateurs Elemental Composition, Mass Property et Isotopic Distribution peuvent être exportées vers un fichier distinct. Utilisez le calculateur Elemental

Targeting pour modifier les données du graphique actif. Les données issues des calculateurs Hypermass et Isotopic Distribution peuvent être superposées sur le spectre actif.

---

**Conseil !** Définissez la précision des données du calculateur dans l'onglet Calculators de la boîte de dialogue Appearance Options. Pour ouvrir la boîte de dialogue, cliquez sur **Tools > Settings > Appearance Options**.

---

## Calculateur Elemental Composition

Le calculateur Elemental Composition détermine les compositions potentielles des molécules ou des acides aminés sur la base du rapport masse sur charge. Inscrive ce rapport manuellement ou le sélectionner à partir d'un spectre actif. Ce calculateur crée un tableau contenant les combinaisons d'éléments ou d'acides aminés constituant la masse d'intérêt ainsi que leurs caractéristiques.

Inscrive ou sélectionner des valeurs pour ces paramètres comme la tolérance, l'état-électron et le nombre de charges. Les utilisateurs peuvent également inscrire une liste des éléments possibles et fixer une limite au nombre de chacun.

## Calculateur Hypermass

Le calculateur Hypermass détermine la distribution d'une enveloppe à charges multiples sur la base d'une masse non chargée. Les utilisateurs peuvent sélectionner la masse non chargée, y compris l'adduit et sa polarité.

Le calculateur affiche une représentation graphique de la série Hypermass qui peut être superposée sur le spectre actif. Une liste des données Hypermass est également disponible.

## Calculateur Elemental Targeting

Le calculateur Elemental Targeting réduit le spectre des données sur la base d'un modèle spécifique, principalement celui qui correspond aux distributions isotopiques. Il peut également rechercher un spectre de données MS pour un modèle spécifique de pics qui peut être saisi soit comme une formule, soit comme une distribution isotopique.

Si le calculateur trouve une correspondance, il crée alors un tracé réduit ne contenant que les données relatives au modèle spécifié. Pour un spectre, le calculateur élimine toutes les données sans correspondance. Pour un chromatogramme, le calculateur calcule la cible élémentaire pour chacun des spectres sous-jacents et régénère chaque point du chromatogramme sur la base de ces nouveaux spectres.

## Calculateur Mass Property

Le calculateur Mass Property détermine diverses propriétés comme la masse exacte, la masse moyenne, la précision de la masse et le défaut de masse d'une masse d'intérêt. Le résultat généré par ce calculateur dépend du nombre de champs d'entrée remplis.



## Calculateur Isotopic Distribution

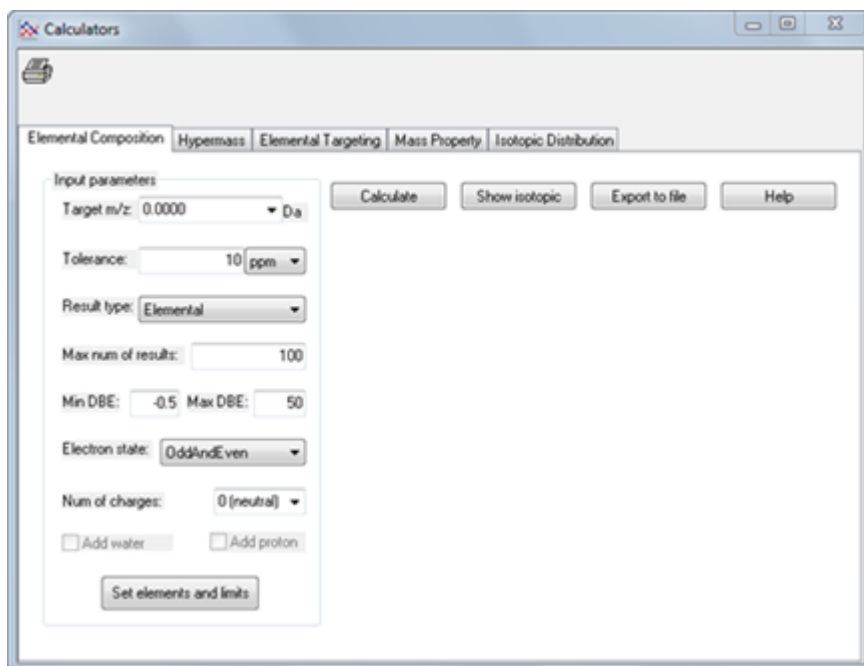
Le calculateur Isotopic Distribution détermine la distribution isotopique sur la base de la formule saisie. Ceci permet aux utilisateurs de faire la distinction entre des composés ayant la même masse sur la base des intensités relatives des isotopes.

La distribution isotopique calculée peut être affichée sous un format graphique ou textuel sur le volet Isotopic Distribution, superposée sur le spectre actif ou exportée vers un fichier distinct.

## Accéder aux calculateurs

Cliquez sur **Tools > Calculators**.

### Illustration 5-2 : Boîte de dialogue Calculators



La boîte de dialogue Calculators s'ouvre.

## Pics centroïdés

Le calcul du centroïde d'un pic convertit les valeurs de distribution des pics en une valeur unique de rapport  $m/z$  et d'intensité représentant le pic. Les données centroïdées recueillies en mode profil simplifient les données et réduisent la taille du fichier. Les données centroïdées fournissent des mesures de pic plus précises et réduisent la quantité de données, mais elles suppriment également les informations sur la forme du pic.

L'algorithme de création de centroïde convertit les pics en valeurs uniques en ayant recours à une moyenne pondérée d'intensité pour calculer le centre de gravité du pic. Le résultat de l'algorithme est une liste de pics avec des paramètres, comme le montre le tableau suivant.

**Tableau 5-1 : Paramètres de pics**

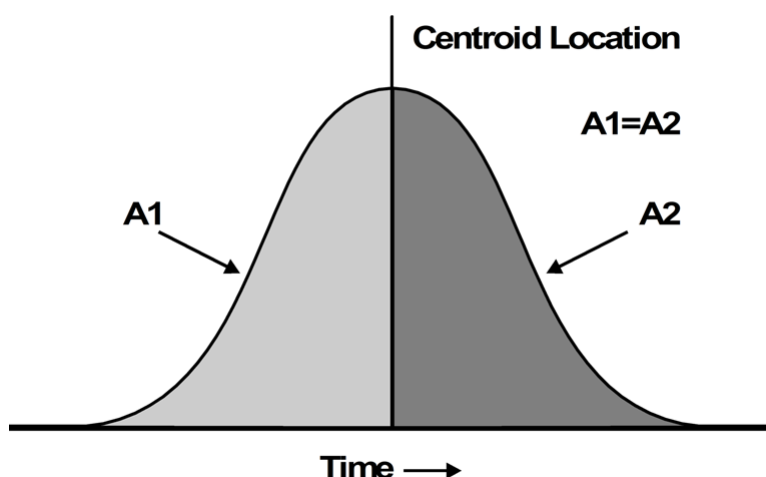
Paramètre	Définition
Centroid value	Valeur des données centroïdées en unités de masse ou de temps
Intensity	Intensité de chaque pic en cps
Width	Largeur du pic centroïdé en Da

Les données sont automatiquement calculées sous la forme d'un centroïde lorsqu'elles sont ajoutées à une bibliothèque ou qu'une recherche est effectuée.

### Calculer le centroïde d'un pic

1. Sélectionnez un volet contenant un spectre.  
Le calcul du centroïde du pic modifie l'aspect du graphique existant. Pour comparer le résultat avec les données originales, effectuez une copie du graphique avant de calculer le centroïde.
2. Cliquez sur **Explore > Centroid**.  
Les données sont centroïdées.

**Illustration 5-3 : Emplacement du centroïde d'analyte**



## Analyse des données

Les utilisateurs peuvent ouvrir des fichiers contenant des données existantes ou des données en cours d'acquisition. Toutes les données relatives aux expériences peuvent également être affichées sous forme de tableau. Le volet Table comporte deux onglets : Data List et Peak List. L'onglet Data List contient les informations relatives aux expériences, comme la durée de l'acquisition et l'intensité du balayage. L'onglet Peak List contient des informations relatives aux pics telles que la hauteur du pic, l'aire du pic et le type de référence.

## Chromatogramme en courant ionique total

Un Chromatogramme en courant ionique total (TIC) est créé en additionnant les contributions d'intensité de tous les ions provenant d'une série de balayages de masse. Les utilisateurs peuvent utiliser le TIC pour afficher un ensemble de données complet dans un même volet. Il représente la somme des intensités de tous les ions dans un balayage en fonction du temps dans un volet chromatographique. Si les données contiennent des résultats issus de plusieurs expériences, l'utilisateur peut créer un TIC pour chaque expérience et un autre TIC représentant la somme de toutes les expériences. Le TIC prédéfini représentant la somme de toutes les expériences est représenté avec un outil de fractionnement sous le centre de l'axe des abscisses.

## Chromatogramme d'ions extraits

Un chromatogramme d'ion est créé en prenant les valeurs d'intensité à une valeur de masse discrète ou une plage de masses dans une série de balayages spectraux de masse. Il indique le comportement d'une masse donnée ou d'une plage de masses, en fonction du temps. L'intensité de l'ion ou la somme des intensités de tous les ions dans une plage donnée est représentée dans un volet chromatographique.

## Chromatogramme de pics de base

Un chromatogramme de pics de base (BPC) affiche l'intensité de l'ion le plus intense de chaque balayage en fonction du nombre de balayages ou du temps de rétention. Il est particulièrement utile quand le TIC est tellement dominé par le bruit qu'il existe un grand décalage et que les pics chromatographiques sont difficiles à distinguer. Il permet également de différencier les composants en coélution. Les BPC peuvent être générés uniquement à partir des données d'une seule période et d'une seule expérience.

Le graphique utilise deux couleurs alternant à chaque fois que la masse du pic de base change. Les changements de couleur sont conservés quand les données sont manipulées par défilement ou par zoom. Pour plus d'informations sur la sélection des couleurs utilisées dans le graphique, consultez l'aide.

## Chromatogramme de longueurs d'onde extraites

Un chromatogramme de longueurs d'onde extraites (XWC) est créé en mesurant les valeurs d'intensité à une certaine longueur d'onde ou en additionnant les absorbances d'une plage de longueurs d'onde.

## Détecteur à barrettes de diodes

Les utilisateurs peuvent afficher le spectre du détecteur à barrettes de diodes (DAD) pour un moment donné ou une période sous la forme de chromatogramme de longueurs d'onde totales.

## Chromatogramme de longueurs d'onde totales

Le chromatogramme de longueurs d'onde totales (TWC) est un chromatogramme d'utilisation moins fréquente. Il indique l'absorbance totale (mAU) en fonction du temps. Le TWC permet d'afficher un ensemble complet de données dans un même volet. Il

représente la somme des absorbances de tous les ions dans un balayage tracé par rapport au temps dans un volet chromatographique. Si les données contiennent des résultats issus de plusieurs expériences, l'utilisateur peut créer un TWC pour chaque expérience et un autre TWC représentant la somme de toutes les expériences.

## Superposer des graphiques

Deux ou plusieurs ensembles de données peuvent être comparés visuellement en superposant des graphiques créés par des méthodes similaires. Chaque spectre individuel se différencie par la couleur de son tracé. Pour les données de balayage complet, ceci permet aux utilisateurs de visualiser les différences entre plusieurs spectres d'échantillon.

Si un ou plusieurs volets sont choisis, chaque XIC s'ouvre dans un volet distinct.

---

**Conseil !** Pour superposer moins de quatre graphiques dans le même volet, appuyez sur la touche **Ctrl**, cliquez avec le bouton droit de la souris sur un volet, puis cliquez sur **Appearance Options**. Dans la boîte de dialogue Appearance Options, sous l'onglet Multiple Graph Options, sélectionnez **Yes** pour les champs **Overlay Multiple Panes** correspondant à **Spectrum** et **Chromatogram**.

---

1. Sélectionnez le premier volet à superposer.
2. Cliquez sur **Explore > Overlay**.
3. Cliquez dans le second volet.

Les graphiques sont alors superposés et les deux tracés portent une couleur différente.

---

**Conseil !** Pour afficher une liste des graphiques superposés codés par couleur, effectuez un clic droit sur la barre de titre du volet.

---

## Alterner les graphiques superposés

1. Sélectionnez un volet qui contient des graphiques superposés.
2. Cliquez sur **Explore > Cycle Overlays**.  
L'affichage fait apparaître le prochain graphique de la séquence au premier plan.

## Additionner les superpositions

Si plusieurs graphiques sont superposés, les utilisateurs peuvent les additionner pour obtenir un nouveau tracé. Chaque point du nouveau tracé correspond à la somme des points des graphiques. L'addition de plusieurs superpositions d'un type de données similaire peut faciliter et accélérer les opérations de traitement suivantes. Par exemple, les utilisateurs peuvent superposer plusieurs XIC, les additionner, puis lisser la superposition additionnée afin de supprimer le bruit.

L'addition des superpositions est similaire à la génération d'un TIC, avec l'avantage de pouvoir choisir les graphiques à superposer. Par exemple, si dix expériences sont affichées, le TIC ajoute les dix expériences ensemble. Si les superpositions sont additionnées, les utilisateurs ont la possibilité de n'ajouter que neuf des dix graphiques superposés. Cette

procédure peut être utilisée si les données recueillies lors de la première expérience ne correspondent qu'à du bruit.

1. Superposez les graphiques qui doivent être additionnés.
2. Cliquez sur **Explore > Sum Overlays**.  
Les graphiques superposés sont additionnés.

## Personnaliser les graphiques

Les graphiques peuvent être personnalisés en utilisant le style prédéfini pour les étiquettes, les légendes et les textes sur les graphiques et les chromatogrammes. Les utilisateurs peuvent sélectionner les polices à utiliser pour les étiquettes de pics et d'axes ainsi que les couleurs à utiliser pour les tracés. Ils peuvent également ajouter des étiquettes d'axes ainsi que le type d'étiquette et de précision pour les pics.

### Ajouter des légendes à un graphique

Utilisez des légendes pour étiqueter les pics d'intérêt ou les points significatifs du graphique. Lorsqu'une légende est placée près d'un pic, elle le suit en cas de zoom avant ou arrière sur le graphique. Les légendes suivent aussi l'échantillon original lorsque les utilisateurs naviguent entre les échantillons dans un fichier de données. Une légende contient une ligne de texte avec un maximum de 128 caractères.

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquez sur **Add Caption**. La boîte de dialogue Add Caption s'ouvre.
2. Dans la zone **Caption**, saisissez le texte.
3. Pour changer la taille et le style de la légende, cliquez sur **Font**.
4. Pour placer la légende, cliquez sur **OK**.

---

**Conseil !** Si la légende n'est pas bien placée, faites-la glisser vers une meilleure position. La légende reste à la même place par rapport aux axes des abscisses et des ordonnées en cas de zoom avant ou arrière sur le graphique. Pour modifier ou supprimer la légende, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la légende, puis cliquez sur la commande appropriée.

---

### Ajouter du texte à un graphique

Utiliser du texte pour ajouter plusieurs lignes d'informations à un graphique. Contrairement aux légendes qui sont associées à un pic spécifique et se déplacent avec lui lorsqu'un zoom est effectué sur le graphique, les étiquettes de texte restent à leur emplacement initial au cours du zoom sur le graphique. Elles ne restent pas avec l'échantillon initial lorsque les utilisateurs naviguent entre les échantillons dans un fichier de données.

1. Cliquer droit dans le graphique, puis cliquer sur **Add User Text**.  
La boîte de dialogue Add User Text s'ouvre.
2. Saisir le texte dans le champ **User Text**.
3. Pour centrer le texte, sélectionner la case à cocher **Center Text**.

4. Pour changer la taille et le style de la légende, cliquer sur **Font**.
5. Pour insérer le texte, cliquer sur **OK**.

---

**Conseil !** Si la position du texte n'est pas satisfaisante, faire glisser le texte vers une position différente. Pour modifier ou supprimer le texte, cliquer droit sur le texte, puis sélectionner la commande appropriée.

---

## Compound Database

La base de données des composés renferme des informations sur ces derniers, y compris les spécifications d'optimisation. Utilisez la base de données des composés lorsque les échantillons et les composés à optimiser rapidement sont nombreux. La fenêtre Compound Database stocke les conditions optimisées des composés qui peuvent être extraits pour traiter des échantillons. Pour plus d'informations, consultez le document *Aide*.

## Graphiques de contour

Un graphique de contour est un graphique à code couleur d'un ensemble de données utilisant les couleurs pour représenter une troisième dimension dans le graphique. Dans le graphique de contour d'un TIC, l'axe des abscisses représente le temps de rétention ou le nombre de balayages, tandis que l'axe des ordonnées représente la masse et la couleur représente l'intensité des données à ce point. Dans le graphique de contour d'un TWC pour des données DAD, l'axe des abscisses représente le temps de rétention ou le nombre de balayages tandis que l'axe des ordonnées représente la longueur d'onde et la couleur représente l'absorbance. Le graphique de contour est un outil post-acquisition qui ne fonctionne pas pour une acquisition de balayage en temps réel.

---

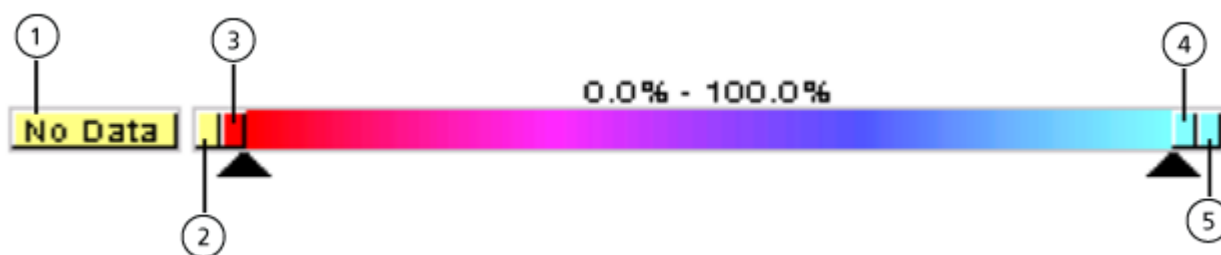
**Remarque :** Le graphique de contour ne prend pas en charge les balayages MI ou MRM, mais prend en charge les balayages DAD.

---

La couleur est le troisième axe dans les graphiques de contour et elle représente l'intensité ou l'absorbance. Les utilisateurs peuvent modifier les valeurs d'intensité ou d'absorbance haute et basse dans un graphique de contour à l'aide des triangles de contrôle sur la barre de couleur au-dessus du graphique de contour. Les paramètres de pourcentage au-dessus du volet Contour Plot indiquent les valeurs des curseurs bas et haut. Les valeurs réelles sont basées sur un pourcentage de l'absorbance ou de l'intensité maximale à l'intérieur de la zone sélectionnée. La valeur apparaît dans l'angle supérieur droit du volet Contour Plot.

Les commandes affichées sur la figure suivante modifient les couleurs d'un graphique de contour.

Illustration 5-4 : Boutons contrôlant les couleurs du graphique de contour



Élément	Description
1	No data
2	Below low data
3	Low data
4	High data
5	Above high data

Les utilisateurs peuvent définir les couleurs d'un graphique de contour pour offrir un meilleur contraste et afficher les spécifications des données en fonction de leurs besoins. Par exemple, la définition de l'intensité/la longueur d'onde et la modification de la couleur des valeurs pour **Below Low Data** et **Above High Data** permettent d'éliminer le bruit de fond dans un graphique de contour.

Les boutons **Below Low Data** et **Above High Data** permettent de réduire et de développer la barre de couleur si les commandes du curseur sont déplacées. Lorsque les couleurs du graphique de contour sont modifiées, les nouvelles couleurs deviennent les couleurs prédéfinies pour tous les graphiques suivants.

Tableau 5-2 : Menu contextuel des volets de graphiques de contour

Commande	Fonction
<b>Show DAD Spectrum</b>	(Afficher le spectre DAD)Affiche le spectre DAD dans un nouveau volet.
<b>Extract Wavelengths (Use Range)</b>	(Extraire les longueurs d'onde (Utiliser la plage))Extrait jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.
<b>Extract Wavelengths (Use Maximum)</b>	(Extraire les longueurs d'onde (Utiliser le maximum))Extrait les plages de longueurs d'onde en utilisant les longueurs d'onde maximales.
<b>Zoom to selection</b>	(Zoomer sur la sélection)Effectue un zoom avant sur la zone sélectionnée.
<b>Add User Text</b>	(Ajouter un texte personnalisé)Ajoute une zone de texte à l'emplacement du curseur.

Tableau 5-2 : Menu contextuel des volets de graphiques de contour (suite)

Commande	Fonction
Undo Zoom	(Annuler le zoom)Rétablit l'échelle d'origine du graphique.
Delete Pane	(Supprimer le volet)Supprime le volet sélectionné.
Show Cross-Hair	(Afficher le réticule)Affiche le réticule (nm/min).

### Afficher un graphique de contour

Un graphique de contour peut être affiché uniquement après l'acquisition. Les utilisateurs peuvent afficher un graphique de contour à partir de graphiques TIC, XIC, TWC ou XWC. Les TIC et les XIC sont disponibles pour tous les fichiers de données wiff. Les TWC et XWC sont disponibles uniquement pour les données acquises par un DAD ou un PDA.

1. En mode Explore, ouvrez un fichier de données comme un graphique TIC, XIC, TWC ou XWC.
2. Mettez en surbrillance la plage à afficher dans le graphique de contour. Si aucune sélection n'est effectuée, la plage complète s'affiche.
3. Cliquez sur **Explore > Show > Show Contour Plot**.  
Un graphique de contour de la zone sélectionnée s'ouvre dans un volet séparé.

---

**Conseil !** Pour fermer un volet Contour Plot, cliquez avec le bouton droit de la souris dans le volet Contour Plot puis cliquez sur **Delete Pane**.

---

### Sélectionner une zone dans un graphique de contour

Pour effectuer un zoom avant sur une sélection ou afficher le spectre de masse correspondant à cette sélection, effectuez l'une des opérations suivantes :

- Pour sélectionner une zone standard dans un cadre, faites glisser le pointeur pour dessiner un cadre autour d'une zone dans le graphique de contour.
- Pour effectuer une sélection verticale, appuyez sur **Ctrl**, puis faites glisser le pointeur verticalement.
- Pour effectuer une sélection horizontale, appuyez sur la barre d'espace et faites glisser le pointeur horizontalement.

### Définir l'intensité et l'absorbance dans un graphique de contour

Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Pour définir la valeur de l'intensité/l'absorbance basse dans un graphique de contour, depuis la barre de couleurs située au-dessus du graphique de contour, faites glisser le curseur triangulaire gauche jusqu'à l'emplacement souhaité.



Le graphique de contour adapte automatiquement la couleur des valeurs inférieures au réglage pour indiquer qu'elles sont en dehors de la plage.

- Pour définir la valeur de l'intensité/l'absorbance haute dans un graphique de contour, depuis la barre de couleurs située au-dessus du graphique de contour, faites glisser le curseur triangulaire droit jusqu'à l'emplacement souhaité.

Le graphique de contour adapte automatiquement la couleur des valeurs supérieures au réglage pour indiquer qu'elles sont en dehors de la plage.

## Modifier les couleurs dans un graphique de contour

---

**Conseil !** En utilisant la palette Define Custom Colors, les utilisateurs peuvent créer des couleurs personnalisées à utiliser dans un graphique de contour.

---

1. Dans le volet Contour Plot, cliquez sur l'un des boutons de couleur.  
La boîte de dialogue Color s'ouvre.

---

**Remarque :** Cinq boutons permettent de contrôler la couleur dans un graphique de contour. Leur nom affiche son nom lorsque le curseur est positionné dessus. Cela permet de modifier la caractéristique correcte. De plus, les boutons Below Low Data et Above High Data permettent de rétrécir et de développer la barre de couleurs si l'utilisateur déplace les commandes de curseur. Lorsque l'utilisateur a modifié les couleurs du graphique de contour, celles-ci deviennent les couleurs par défaut de tous les graphiques suivants.

---

2. Cliquez sur une couleur.
3. Cliquez sur **OK**.  
Le graphique change alors pour tenir compte de la modification de couleur.

## Algorithme Dynamic Background Subtraction

L'algorithme Dynamic Background Subtraction améliore la détection des ions précurseurs dans une expérience IDA (acquisition dépendante de l'information). Lorsque l'algorithme est activé, l'IDA utilise un spectre dont le fond a été soustrait afin de sélectionner l'ion précurseur d'intérêt pour l'analyse MS/MS au lieu de sélectionner directement le précurseur à partir du spectre d'exploration. Comme ce processus a lieu pendant l'analyse LC, l'algorithme permet de détecter des espèces lorsque l'intensité de leur signal augmente. Ainsi, cet algorithme se concentre sur la détection et l'analyse des ions précurseurs sur la partie ascendante du pic LC, jusqu'à ou légèrement au-dessus du haut des pics LC.

## Interprétation de la fragmentation

L'outil Fragment Interpretation aide l'utilisateur à interpréter les données MS/MS. L'outil Fragment Interpretation génère une liste de masses de fragment théoriques à partir du clivage des liaisons simples non cycliques d'une structure moléculaire. La structure moléculaire peut être créée dans un programme de dessin tiers, puis enregistrée en tant que fichier mol. L'outil peut alors faire correspondre la liste théorique avec les pics du spectre de masse actuel. L'interprétation de la fragmentation met en évidence les fragments théoriques dans la liste des fragments et compare les masses de fragment aux pics du spectre de

masse. Les pics se situant au-dessus du seuil d'intensité et dans la fourchette de tolérance de masse définie par l'utilisateur (2 Da maximum) pour les masses de fragment sont considérés comme des concordances et apparaissent en gras dans la liste des fragments.

---

**Remarque :** L'outil Fragment Interpretation ne peut pas être utilisé pour les types de balayage suivants :

- Ion précurseur
  - Perte neutre
  - Q1 ions multiples
  - Q3 ions multiples
  - Suivi de réactions multiples (MRM)
- 

## Connecter l'outil d'interprétation de la fragmentation à un spectre

Lorsqu'une liaison simple non cyclique dans la structure moléculaire est sélectionnée, l'outil d'interprétation de la fragmentation met en surbrillance les deux fragments créés lors du clivage de la liaison et les pics correspondants dans le spectre connecté sont affichés.

Si plusieurs volets de spectre sont affichés, l'outil d'interprétation de la fragmentation se connecte au spectre actif. Si le fichier de données contient plusieurs échantillons, l'outil d'interprétation de la fragmentation se connecte au spectre actif.

Si un spectre est ouvert lorsque l'outil d'interprétation de la fragmentation est ouvert, le panneau actif se lie automatiquement au spectre ouvert.

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Cliquez sur le bouton de connexion situé en bas à droite du volet Fragment Interpretation.  
Le pointeur prend l'aspect de l'outil de connexion.
3. Cliquez sur le graphique du spectre qui doit être connecté à l'outil Fragment Interpretation.  
L'indicateur de connexion du graphique en bas à gauche contient le nom du graphique connecté au volet Fragment Interpretation. La connexion est rompue lors de la fermeture du graphique ou du volet Fragment Interpretation. Si le fichier wiff connecté comporte plusieurs échantillons, le volet Fragment Interpretation se met à jour automatiquement à mesure que les utilisateurs font défiler les échantillons.

## Relier les fragments aux pics

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Avec un fichier mol dans le volet Fragment Interpretation, sélectionner une cellule dans la liste des fragments qui s'affiche en gras.

Dans le spectre, le logiciel met en surbrillance le pic spectral correspondant dans la couleur sélectionnée sous l'onglet Options. Dans la structure moléculaire, la liaison est mise en évidence.

3. Si l'utilisateur clique sur une ligne qui comporte plus d'un fragment correspondant, le pic spectral qui s'approche le plus de sa masse monoisotopique est alors mis en surbrillance dans le spectre de masse dans la couleur spécifiée dans l'onglet Options.

## Sélectionner une liaison dans une structure moléculaire

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Avec un fichier mol ouvert dans le volet Fragment Interpretation, cliquer sur une liaison simple non cyclique dans la structure moléculaire.

Les deux fragments obtenus s'affichent en surbrillance dans la liste des fragments. La masse des deux fragments s'affiche de chaque côté de la liaison.

Si un spectre est connecté, l'outil d'interprétation de la fragmentation affiche tous les pics correspondants dans le graphique. Si un fragment dans la liste est sélectionné et que le fragment est mis en correspondance avec un pic, la fenêtre Fragment Interpretation effectue alors un zoom avant sur ce pic.

## Afficher les isotopes

L'outil d'interprétation de la fragmentation peut afficher la distribution isotopique théorique pour un pic correspondant à un fragment de la liste des fragments.

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Dans le volet Fragment Interpretation, cliquer sur l'onglet **Options**.
3. Cliquer sur la case à cocher **Show Isotopes**.
4. Cliquer sur **Apply**.
5. Dans la liste des fragments, sélectionner un fragment qui correspond à un pic. La distribution isotopique pour les pics correspondants s'affiche dans le spectre.

## Afficher une différence de formule dans un spectre

La différence de formule et de masse monoisotopique entre deux fragments hypothétiques liés peut être affichée. La différence de formule est affichée lorsque deux pics sont sélectionnés. La différence de formule et de masse monoisotopique est affichée lorsque deux fragments ou deux liaisons simples non cycliques sont sélectionnés,.

1. Cliquez sur un pic de fragment.
2. Appuyez sur **Shift**, puis cliquez sur un autre pic de fragment.  
Si la différence de formule est égale à un fragment de la liste des fragments, le fragment apparaît en surbrillance dans la liste. Sinon, la différence de formule entre les fragments correspondants des pics s'affiche dans une fenêtre de message.

### Afficher une différence de formule dans la liste des fragments

1. Cliquez sur le numéro de ligne correspondant à un fragment.
2. Appuyez sur **Ctrl**, puis cliquez sur un autre fragment.  
La différence de formule et de masse monoisotopique s'affiche dans une fenêtre de message si les fragments sont liés.

### Afficher une différence de formule dans une structure moléculaire

1. Cliquez sur une liaison simple non cyclique. Le fragment prédéfini (parmi les deux fragments en surbrillance) est sélectionné. Pour sélectionner l'autre fragment de la liaison rompue, appuyez sur **Ctrl**, puis cliquez sur la liaison.
2. Sélectionnez une seconde liaison non cyclique. Pour sélectionner le fragment prédéfini, appuyez sur **Shift**, puis cliquez sur la liaison. Pour sélectionner l'autre fragment de la liaison rompue, appuyez sur **Ctrl+Shift**, puis cliquez sur la liaison.  
L'interprétation de la fragmentation calcule la différence de formule et de masse monoisotopique entre le fragment sélectionné à l'étape 1 et le fragment sélectionné à l'étape 2, si les deux sont liés. La différence de formule et de masse monoisotopique s'affiche dans une fenêtre de message.

## IDA Explorer

IDA (acquisition dépendante de l'information) Explorer est utilisé pour afficher les données acquises via une méthode IDA.

IDA Explorer peut être activé et désactivé dans l'onglet IDA Explorer de la boîte de dialogue Appearance Options. Les colonnes présentes dans la vue List peuvent également être définies dans cet onglet.

Le côté gauche du visualiseur présenté dans la figure suivante affiche les masses qui ont fait l'objet d'un balayage des ions produits. Dans cette zone, les utilisateurs peuvent examiner dans une vue List ou Tree la masse, l'intensité, l'heure et l'énergie de collision des ions sur lesquels les balayages d'ions produits ont été effectués. Dans la vue List, il suffit de double-cliquer sur l'en-tête d'une colonne pour trier la liste. Utilisez la boîte de dialogue Appearance Options pour personnaliser les colonnes dans la vue List.

Du côté droit, le visualiseur est scindé en quatre volets. Le volet supérieur gauche affiche les données du TIC d'exploration. Le volet inférieur gauche affiche le XIC de la masse. Le volet supérieur droit affiche l'exploration ou l'exploration alternant avec des balayages à résolution améliorée (ER), et le volet inférieur droit affiche le balayage produit.

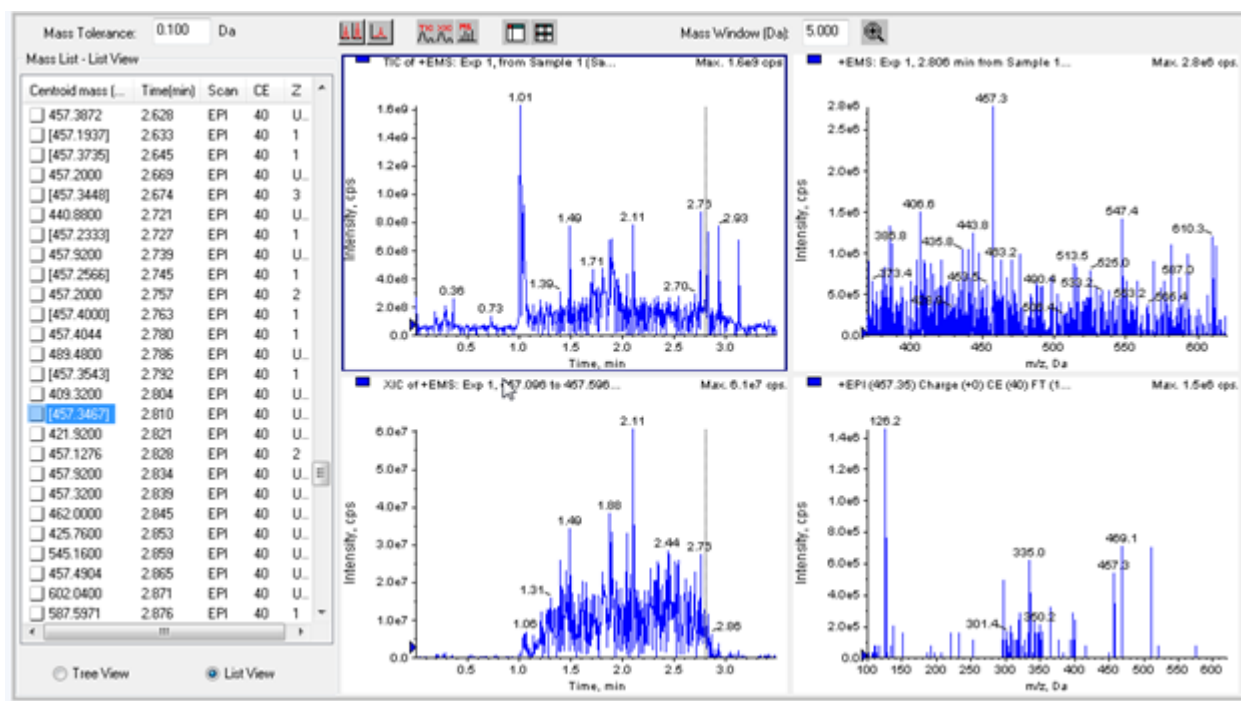
Le visualiseur IDA répertorie toutes les masses sur lesquelles les balayages de l'ion produit amélioré (EPI) ou les types de balayage ER ont été réalisés. Dans le visualiseur IDA, les utilisateurs peuvent effectuer les opérations suivantes :

- Cliquer sur une masse dans la vue List ou Tree pour afficher les tracés correspondant à cette masse.

- Afficher le spectre d'exploration à partir duquel la masse a été identifiée et le spectre du produit de cette masse.
- Afficher le TIC du balayage d'exploration et le XIC de chaque masse.

**Remarque :** Les crochets autour d'une masse indiquent que la masse a été fusionnée. Une masse fusionnée est contiguë sur un certain nombre de cycles. Quand une masse fusionnée est affichée, elle indique un spectre moyen contenant la moyenne de tous les spectres contigus.

### Illustration 5-5 : IDA Viewer



## Bases de données de la bibliothèque

La fonction Library Search compare les spectres inconnus aux spectres MS connus présents dans la base de données de la bibliothèque et génère une liste de correspondances possibles. Utilisez Library Search pour créer et gérer une base de données de spectres de masse pouvant être utilisée pour rechercher et faire correspondre des spectres inconnus avec les spectres de masse stockés dans la base de données.

Avec Library Search, les utilisateurs peuvent :

- comparer les contenus de la bibliothèque à un spectre inconnu,
- ajouter des enregistrements à la bibliothèque,
- modifier les enregistrements existants.

Les données de la bibliothèque peuvent être stockées dans les emplacements suivants :

- MS Access sur une base de données locale

- MS SQL Server

Avant d'utiliser la fonction Library Search, déterminez l'emplacement de la base de données de la bibliothèque et connectez l'ordinateur à cet emplacement. Les bases de données de la bibliothèque peuvent être stockées localement sur un ordinateur ou sur un serveur en réseau.

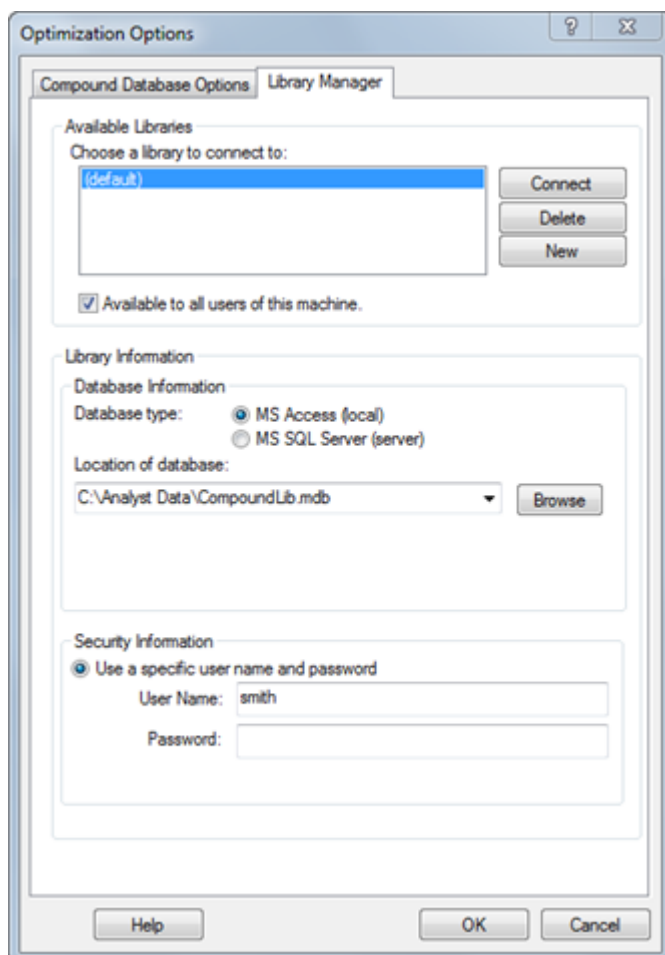
Utilisez un alias pour vous connecter à une base de données. Dans ce cas, l'alias spécifie une connexion à une base de données spécifique et peut inclure le nom d'utilisateur et le mot de passe requis pour y accéder. Par exemple, un utilisateur peut disposer sur son ordinateur d'une petite base de données de bibliothèque portant sur des composés identifiés et l'entreprise peut disposer d'une base de données centrale que les utilisateurs emploient parfois. La création d'un alias pour chaque base de données permet à l'utilisateur de passer rapidement de l'une à l'autre. Pour plus d'informations sur la création d'alias, consultez le document Aide.

## Alterner entre les bases de données existantes de la bibliothèque

Les utilisateurs peuvent se connecter à n'importe quelle base de données ayant des alias déjà configurés.

1. Cliquez sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet **Library Manager**.

Illustration 5-6 : Boîte de dialogue Optimization Options - Onglet Library Manager

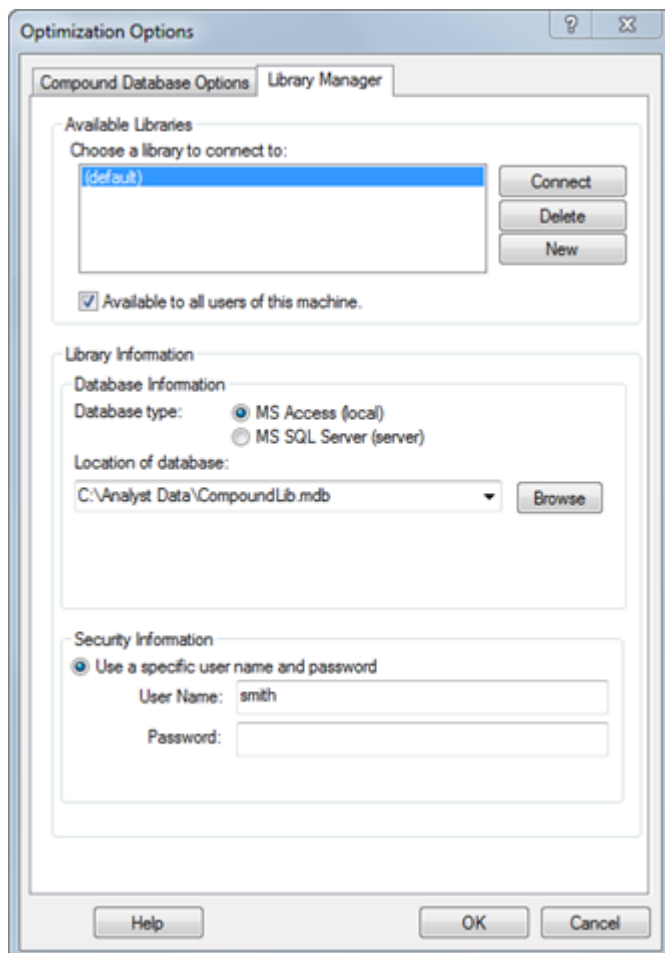


3. Dans la section **Available Libraries**, cliquez sur l'alias de la base de données à laquelle se connecter, puis cliquez sur **Connect**.
4. (Facultatif) Pour autoriser d'autres utilisateurs à accéder à la base de données, cochez la case **Available to all users of this machine**.
5. Cliquez sur **OK**.

## Créer une base de données locale de la bibliothèque

1. Cliquer sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet **Library Manager**.

**Illustration 5-7 : Boîte de dialogue Optimization Options - Onglet Library Manager**



3. Dans la section **Available Libraries**, cliquez sur **New**.

La boîte de dialogue Add Library s'ouvre.



Illustration 5-8 : Boîte de dialogue 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

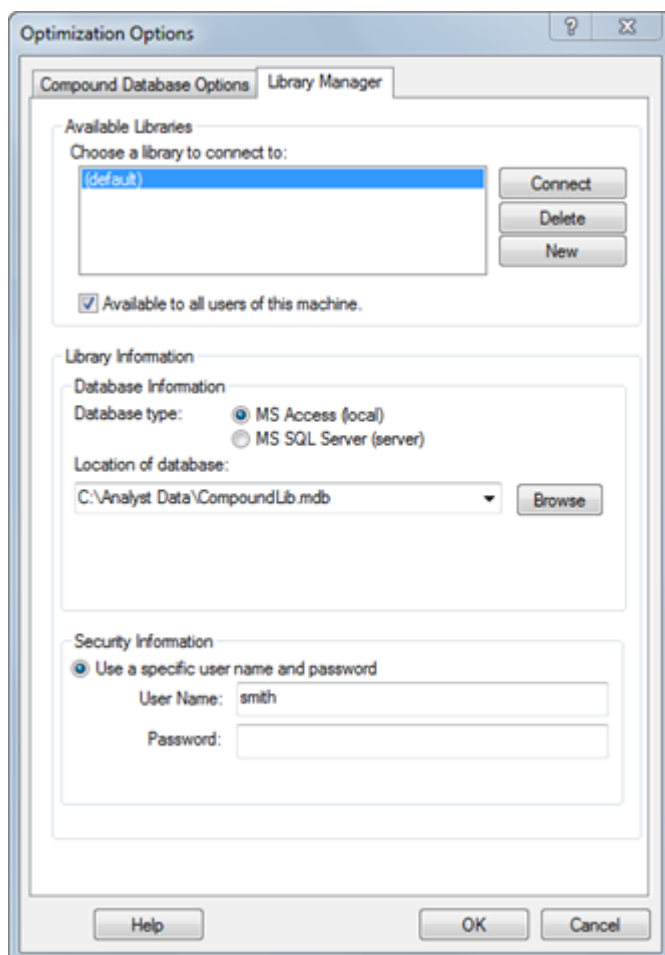
4. Dans le champ **Enter a Name for the Library**, saisissez le nom de bibliothèque.
5. Dans la section **Database Information**, sélectionnez **MS Access (local)**.
6. Indiquez l'emplacement de la base de données.
7. Dans la section **Security Information**, saisissez un nom d'utilisateur et un mot de passe pour accéder à la base de données, le cas échéant.
8. Cliquer sur **Save**.

## Se connecter à une base de données de la bibliothèque sur serveur

1. Cliquer sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.

2. Cliquer sur l'onglet **Library Manager**.

**Illustration 5-9 : Boîte de dialogue Optimization Options - Onglet Library Manager**



3. Dans la section **Available Libraries**, cliquer sur **New**.  
La boîte de dialogue Add Library s'ouvre.
4. Dans le champ **Enter a Name for the Library**, inscrire un nom pour la bibliothèque.
5. Dans la section **Database Information**, sélectionner **MS SQL Server (server)**.

**Illustration 5-10 : Boîte de dialogue 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 name of the database server:

Refresh

Enter the name of the database on the server:

Security Information

☐ Use Windows integrated security ☒ Use a specific user name and password

User Name:

Password:

Save Cancel

6. Saisir le nom du serveur de la base de données.
7. Saisir le nom de la base de données.
8. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Si un nom d'utilisateur et un mot de passe spécifiques sont requis pour accéder à cette base de données, inscrire alors le nom d'utilisateur et le mot de passe.
  - Si la sécurité Windows est utilisée, dans la section Security Information, sélectionner l'option **Use Windows integrated security**.
9. Cliquer sur **Save**.

## Afficher tous les enregistrements de la bibliothèque

Cliquez sur **Explore > Library Search > List**.

La boîte de dialogue Librarian s'ouvre avec tous les enregistrements de la base de données.

## Ajouter un enregistrement dans la bibliothèque.

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquez sur **Add a Record**.  
Le spectre est automatiquement calculé en tant que centroïde. La boîte de dialogue Add a Record s'ouvre avec les données du spectre.

## Analyse des données qualitatives

---

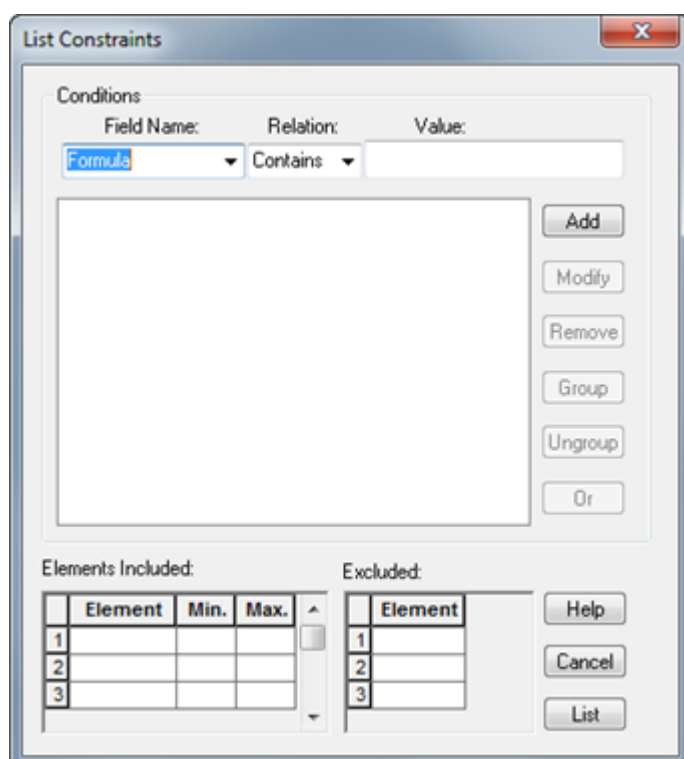
2. Dans l'onglet Mass Spectral Information, saisissez un nom dans le champ **Compound Name**.  
Le nom du composé est obligatoire et doit identifier de manière unique le composé dans la bibliothèque.
3. Modifiez les autres champs souhaités. De nombreux champs sont remplis automatiquement à partir des données associées au spectre.
4. Cliquez sur l'onglet **General Information**.
5. Modifiez les champs selon les besoins.
6. Cliquez sur **OK**.

## Rechercher des enregistrements de la bibliothèque avec contraintes

Utilisez List with Constraints pour restreindre les résultats. Une fois définies, les contraintes sont utilisées pour toutes les recherches.

1. Cliquez sur **Explore > Library Search > List With Constraints**.

**Illustration 5-11 : Boîte de dialogue List Constraints**



La boîte de dialogue List Constraints s'ouvre.

2. Dans la liste **Field Name**, sélectionnez le champ sur lequel appliquer une contrainte.
3. Dans la liste **Relation**, sélectionnez la relation (opérateur) qui s'applique au nom du champ.

4. Dans le champ **Value**, saisissez la valeur du nom du champ en fonction de la relation.
5. Pour ajouter la contrainte sélectionnée à la liste **Conditions**, cliquez sur **Add**.
6. Ajoutez autant de contraintes que nécessaire à la liste de conditions.
7. L'association de contraintes distinctes dans la liste **Conditions** permet de créer des conditions plus précises qui améliorent la recherche. Pour regrouper des contraintes, sélectionnez-les et cliquez sur **Group**. Pour séparer des contraintes groupées, cliquez sur le groupe puis sur **Ungroup**.
8. Pour modifier la relation entre des contraintes, cliquez sur la relation, puis sur **And** ou **Or**.
9. Pour inclure les composés contenant un certain nombre d'atomes d'éléments spécifiques, sélectionnez ou saisissez les éléments dans le tableau **Elements Included**, puis indiquez un nombre minimum et un nombre maximum d'atomes pour chaque élément.

---

**Remarque :** Les symboles des éléments sont sensibles à la casse. Par exemple, l'hydrogène a pour symbole H, et non h, et le sodium Na, et non NA ou na.

---

10. Pour exclure les composés contenant certains éléments, sélectionnez ou saisissez les éléments dans le tableau **Excluded**.
11. Pour rechercher les composés répondant aux critères, cliquez sur **List**.  
Les enregistrements correspondant à toutes les contraintes s'affichent dans le tableau **Records**. Les contraintes de recherche sont enregistrées.

## Conseils pour la recherche en bibliothèque

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Regrouper des conditions	Sélectionnez les conditions à regrouper, puis cliquez sur <b>Group</b> . Cette fonction se comporte comme des parenthèses dans une formule.
Effectuer une recherche sans contraintes	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquez sur <b>Search Library</b> .  La boîte de dialogue Search Results s'ouvre.

## Rechercher un spectre similaire

L'utilisateur peut chercher dans la bibliothèque un spectre (et des informations sur son composé lié) qui correspond (ou est similaire) à un spectre actif. Les recherches peuvent être effectuées avec ou sans contraintes. Lorsque l'utilisateur effectue une recherche avec contraintes, seuls les enregistrements qui correspondent à tous les critères sont répertoriés. Les résultats s'affichent dans une liste classée. Le premier élément de la liste est celui qui correspond le mieux au spectre actif. Les entrées situées plus loin dans la liste correspondent moins bien.

## Analyse des données qualitatives

---

Plus le nombre de contraintes sélectionnées est élevé, plus la liste devient précise et plus les correspondances sont pertinentes et peu nombreuses. Dès qu'un ensemble de contraintes est défini, celles-ci s'appliquent à toutes les recherches suivantes, sauf si elles sont modifiées. Lorsqu'un utilisateur effectue une recherche sans contraintes, la liste de spectres suggérés est bien plus importante, car la bibliothèque trouve moins de correspondances spécifiques avec les données spectrales.

Seuls les pics au-dessus du seuil sont utilisés dans la recherche. Lors de la sélection des contraintes de recherche, l'utilisateur peut également ajouter ou soustraire des pics du spectre actif.

Par exemple, si l'utilisateur pense qu'un pic est en fait un pic de bruit de fond, il ne doit pas être utilisé pour la recherche, car il pourrait fausser les résultats.

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquez sur **Search With Constraints**.

Le logiciel calcule automatiquement le centroïde du spectre.

2. Dans le champ **Maximum Number of Match**, saisissez le nombre maximum de composés que la recherche doit retourner.

### Illustration 5-12 : Boîte de dialogue Search Constraints

Preselect Constraints:	Preset Tolerance:
<input checked="" type="checkbox"/> Mass Tolerance	+/- 0.2 Da
<input type="checkbox"/> Intensity Factor	+/- 2
<input type="checkbox"/> 1st Precursor m/z	+/- 0.25 Da
<input type="checkbox"/> Collision Energy	+/- 5
<input type="checkbox"/> 2nd Precursor m/z	+/- 0.25 Da
<input type="checkbox"/> Excitation Energy	+/- 5
<input type="checkbox"/> Retention Time	+/- 0.1 min
<input type="checkbox"/> Record Contains UV Spectrum	
<input type="checkbox"/> Record Contains Molecular Structure	

3. Dans la section **Preselect Constraints**, cochez les cases correspondant aux contraintes à appliquer.
4. Pour chaque contrainte sélectionnée, saisissez la tolérance dans la section **Preset Tolerance**.
5. Si nécessaire, sélectionnez une méthode de tri des enregistrements dans la liste **Result Sorted by**.
6. Si nécessaire, saisissez du texte dans le champ **Comment Contains**.
7. Si nécessaire, saisissez du texte dans le champ **Keyword Contains**.
8. Pour appliquer des contraintes de pic en ajoutant ou en retirant des pics, cliquez sur **Peak Constraints**.  
Le tableau Peaks Included s'ouvre.
9. Pour ajouter des pics à la liste dans laquelle effectuer la recherche, cliquez sur **Add**, puis saisissez les valeurs  $m/z$  et l'intensité correspondante dans la cellule vide.
10. Pour exclure des pics de la recherche, sélectionnez les pics puis cliquez sur **Remove**.
11. Cliquez sur **Search** pour enregistrer les contraintes et lancer la recherche.

## Afficher un composé à partir des résultats de recherche

Si plusieurs spectres correspondent au spectre inconnu, l'utilisateur peut alors vouloir afficher les spectres connus et les comparer au spectre inconnu.

1. Dans la boîte de dialogue Search Results, dans la liste des composés, sélectionner le numéro de ligne du composé à afficher.
2. Cliquer sur le volet du spectre de l'un des composés connus.  
Le spectre du composé sélectionné s'affiche.

## Fichiers de données traitées

L'utilisateur peut enregistrer les données traitées, comme des présentations et légendes spécifiques, qui ne peuvent être ouvertes qu'en mode Explore. Ces fichiers contiennent également des informations historiques et sont similaires aux fichiers de données, sauf qu'ils ne contiennent que les données du volet actif dans Explore. Ces fichiers portent l'extension pdt et sont stockés dans le dossier de données du projet actuel.

## Enregistrer un fichier de données traitées

1. Sélectionnez le volet de données à enregistrer.
2. Cliquez sur **File > Save Processed Data File**.
3. Dans le champ **File name**, saisissez un nom.
4. Cliquez sur **Save**.

## Ouvrir un fichier de données traitées

1. En mode Explore, cliquer sur **File > Open Processed Data File**.

La boîte de dialogue Load Processed Data File s'ouvre.

2. Sélectionnez un fichier, puis cliquez sur **Open**.

## Données qualitatives

L'utilisateur peut afficher les informations contenues dans un fichier de données sous forme de tableau ou de graphique. Les données graphiques sont présentées sous forme de chromatogramme ou de spectre. Les données d'un tableau sont affichées sous forme de points de données. L'utilisateur peut effectuer diverses opérations de tri sur les données.

Lorsque l'utilisateur ouvre un fichier de données, différents volets s'ouvrent selon le type d'expérience réalisée.

Si la case **MCA** est cochée dans Tune Method Editor, le fichier de données s'ouvre avec le spectre de masse (MS). Si la case **MCA** n'est pas cochée, le fichier de données s'ouvre avec le TIC. Sélectionnez une plage, puis double-cliquez dans le volet TIC à un moment donné pour afficher le MS correspondant à cette plage.

Le logiciel stocke les données dans des fichiers portant les extensions wiff et wiff.scan. Un fichier de données peut contenir des données pour plusieurs échantillons. Le logiciel a besoin à la fois de fichiers wiff et wiff.scan pour ouvrir le fichier de données. Outre les fichiers de données, le logiciel peut ouvrir les fichiers txt. Un fichier txt contient les données d'un seul échantillon.

## Rapport signal-bruit

Le rapport signal-bruit est obtenu en divisant la hauteur du pic par le bruit.

Pour calculer le bruit, le logiciel utilise l'écart-type en employant une moyenne de zéro de tous les points de données du chromatogramme depuis l'heure **Background Start** à l'heure **Background End** (toutes deux sont affichées dans les paramètres avancés de Quantitation Method Editor et dans la fenêtre Peak Review). Ces heures sont définies lorsqu'une nouvelle plage de bruit de fond est définie.

Si l'utilisateur crée une méthode sans définir une nouvelle plage de bruit de fond, ce qui est possible si l'intégration prédéfinie est acceptée sans aucune modification, la valeur de **Background Start** et de **Background End** est **N/A**. Par conséquent, le rapport signal-bruit n'est pas calculé et le champ correspondant dans le tableau de résultats affiche **N/A**.

## Algorithmes de lissage

L'utilisateur peut sélectionner soit l'algorithme de lissage, soit l'algorithme de lissage gaussien comme méthode de lissage. L'opération de lissage implique le remplacement de chaque point de données par la moyenne des points de données avant et après lui. L'ensemble des données lissées remplace l'ancien ensemble.

Les données peuvent être lissées à plusieurs reprises, mais le logiciel ne peut annuler que le dernier lissage.

Le lissage n'est pas disponible pour les spectres à ions multiples (MI) ou MRM.



## Algorithme de lissage

Lors du lissage des données, l'utilisateur définit les valeurs de pondération du point pour trois points de données : le point actuel, le point précédent et le point de données suivant. L'algorithme de lissage multiplie les points de données par les valeurs de pondération attribuées, additionne ces valeurs, puis divise le total obtenu par la somme des valeurs de pondération des points. Ce lissage est plus doux que l'algorithme gaussien et il prend beaucoup de temps pour lisser les données fortement bruitées.

## Algorithme de lissage gaussien

Le lissage gaussien implique de remplacer chaque point de données par la moyenne pondérée d'un certain nombre de points de données situés de part et d'autre du point. La pondération de chaque nouveau point de données est calculée sur la base d'une courbe de Gauss. Ce lissage est plus grossier que celui de l'algorithme de lissage, mais il est utile pour lisser les données fortement bruitées.

Définissez deux valeurs en cas d'utilisation du lissage gaussien :

**Gaussian filter width (% of minimal distance between points)** : largeur utilisée pour calculer la pondération des points voisins. La largeur apparaît en pourcentage de la distance entre deux points du balayage, où la distance prédéfinie de 100 % permet une distribution aussi large que la distance entre les points de données.

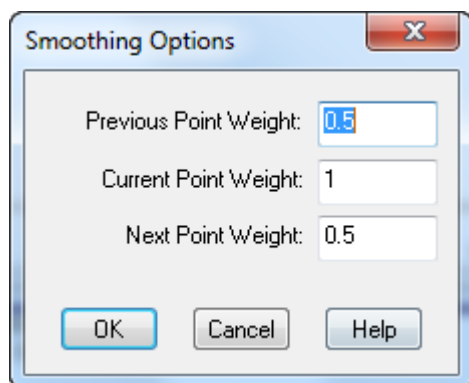
**Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points)** : limites de la courbe de Gauss, exprimées en multiples de la distance entre les points. Par exemple, une valeur prédéfinie de 10 crée une courbe de Gauss qui tronque les largeurs de points de données supérieures à dix de chaque côté du centre.

## Données lissées utilisant l'algorithme de lissage

**Conseil !** Pour annuler le lissage, cliquer sur **Edit > Undo**. Le logiciel prend en charge un niveau d'annulation.

1. Sélectionner un volet contenant un chromatogramme ou un spectre.
2. Cliquer sur **Explore > Smooth**.  
La boîte de dialogue Smoothing Options s'ouvre.

**Illustration 5-13 : Boîte de dialogue Smoothing Options**



## Analyse des données qualitatives

---

3. Dans le champ **Previous Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données précédent.
4. Dans le champ **Current Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données central.
5. Dans le champ **Next Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données suivant.
6. Cliquer sur **OK**.  
L'ensemble de données lissé remplace l'ensemble de données actuel dans le volet.

## Lisser des données avec l'algorithme gaussien

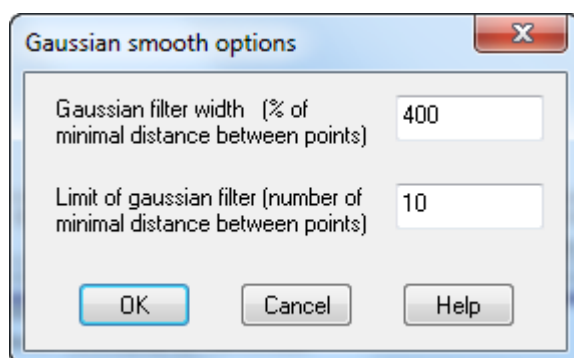
---

**Conseil !** Pour annuler le lissage, cliquez sur **Edit > Undo**. Le logiciel permet d'annuler la dernière action réalisée.

---

1. Sélectionnez un volet contenant un chromatogramme ou un spectre.
2. Cliquez sur **Explore > Gaussian Smooth**.  
La boîte de dialogue Gaussian smooth options s'ouvre.

**Illustration 5-14 : Boîte de dialogue Gaussian smooth options**



3. Dans le champ **Gaussian filter width**, saisissez la largeur utilisée pour trouver la pondération des points voisins en pourcentage de la distance entre deux points.
4. Dans le champ **Limit of gaussian filter**, saisissez la limite de la courbe de Gauss, exprimée en multiples de la distance entre les points.
5. Cliquer sur **OK**.  
L'ensemble de données lissé remplace l'ensemble de données actuel dans le volet.

## Journaux système

Le journal système contient les rapports des événements du système, notamment les erreurs, les avertissements et les messages. Utilisez Windows Event Viewer pour afficher les informations qui pourraient être utiles pour le dépannage et la réalisation des diagnostics du système. Pour utiliser efficacement les informations présentes dans le journal système, filtrez-le pour n'afficher que les éléments pertinents pour le logiciel.

Pour comprendre les informations figurant dans les journaux système et résoudre les erreurs, consultez le Journal des événements des applications Windows. Il contient des informations de dépannage utiles.

## Enregistrer le journal système et le transmettre au support

1. Cliquez sur **View > Event Log**.
2. Cliquez sur le signe plus à droite du dossier **Windows Logs**.
3. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur **Application**.
4. Cliquez sur **Save All Events As**.  
La boîte de dialogue Save As s'ouvre.
5. Saisissez un nom de fichier, puis cliquez sur **Save**.  
La boîte de dialogue Display Informations s'ouvre.
6. Cliquez sur **Display information for these languages**.
7. Vérifiez que l'option **English (United States)** est sélectionnée.
8. Cliquez sur **OK**.
9. Joignez le fichier à un courrier électronique, puis envoyez celui-ci à SCIEX.

---

**Remarque :** Pour d'autres fonctionnalités de connexion et d'autres solutions de dépannage, contactez [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support).

---

## Filtrer le journal système pour trouver des informations concernant le logiciel Analyst MD

1. Cliquez sur **View > Event Log**.  
La boîte de dialogue Event Viewer s'ouvre.
2. Double-cliquez sur le dossier **Windows Logs**.
3. Cliquez sur **Application**.
4. Cliquez sur **Action > Filter Current Log**.  
La boîte de dialogue Filter Current Log s'ouvre.
5. Sélectionnez **Analyst** dans le champ **Event Sources**.
6. Cliquez sur **OK**.  
La boîte de dialogue Event Viewer n'affiche maintenant que les événements concernant le logiciel Analyst MD.

# Analyse des données quantitatives 6

---

## Options d'étalonnage

Les options d'étalonnage définissent les paramètres d'une courbe d'étalonnage qui sont utilisés pour déterminer la concentration calculée des échantillons. La courbe est un tracé des concentrations du standard par rapport à la surface ou à la hauteur du standard si aucun standard interne n'est utilisé. Si un standard interne est utilisé, la courbe est un tracé d'un rapport des concentrations par rapport à un rapport des surfaces ou des hauteurs. Cette courbe est utilisée, en plus des surfaces (ou des hauteurs) pour les échantillons inconnus, pour interpoler la concentration calculée.

Choisir le meilleur type de régression ou le meilleur ajustement pour ajuster la courbe aux points ainsi que le meilleur facteur de pondération pour le projet.

## À propos des courbes d'étalonnage

La courbe d'étalonnage est utilisée pour déterminer la concentration calculée des échantillons, y compris les échantillons de CQ. C'est une courbe qui résulte du tracé de la concentration du standard versus sa surface ou sa hauteur, ou de rapports, si un standard interne est utilisé. La surface ou la hauteur d'un échantillon est alors appliquée à cette courbe afin de déterminer la concentration de l'échantillon, comme indiqué dans le tableau de résultats. L'équation de régression générée par cette courbe d'étalonnage est utilisée pour calculer la concentration des échantillons inconnus.

Le logiciel place les concentrations (ou rapports) connues sur l'axe des x et la surface calculée ou la hauteur (ou le rapport) sur l'axe des y. Il trace alors les points pour tous les standards du lot. Le système produit une courbe de meilleur ajustement à ces points via le type de régression et de pondération qui est sélectionné. Cette courbe est utilisée, en plus des surfaces (ou des hauteurs) pour les échantillons inconnus, pour interpoler la concentration.

## Sélectionner le meilleur type de régression

Après avoir sélectionné un type de régression (Fit), l'utilisateur ne peut pas voir la courbe d'étalonnage depuis l'assistant. Il est préférable d'utiliser les valeurs prédéfinies, de faire appel à son expérience ou à la politique de l'entreprise pour choisir un type de régression.

Après avoir modifié le paramètre Fit, vérifiez les modifications apportées dans la colonne **Accuracy** du tableau de résultats. Plus le paramètre Fit est ciblé, plus l'analyse quantitative sera précise.

La courbe d'étalonnage trace les concentrations du standard par rapport à son aire ou sa hauteur de pic (ou des rapports, si un standard interne est utilisé). Lorsque les points des standards sont tracés, déterminez le meilleur paramètre Fit de la courbe en ces points et indiquez ce choix dans la boîte de dialogue Specify Calibration de l'assistant. Le paramètre Fit prédéfini est Linear, ce qui suppose que tous les standards suivront une ligne droite. Sélectionnez l'un des types de Fit dans le tableau suivant.

Tableau 6-1 : Types de Fit

Fit	Description
Linear	La régression linéaire suppose que les points standard suivent une ligne droite.
Linear Through Zero	La régression linéaire passant par l'origine suppose que les points standard constituent une ligne droite et que cette ligne de points passe par l'origine des axes x et y. Utilisez ce paramètre pour forcer la ligne à passer par l'origine.
Quadratic	Si les points standard ne constituent pas une ligne droite, utilisez la régression quadratique pour obtenir un ajustement quadratique aux points de données.
Mean Response Factor	Si les points standard constituent une ligne droite, pour établir la moyenne des points, utilisez la régression avec facteur de réponse moyenne pour obtenir une moyenne de la pente en chaque point de la courbe.
Power	Si la ligne de points présente des zones linéaires et des zones courbes, utilisez la régression Power plutôt que la régression Linear ou Quadratic pour obtenir une ligne quelque part entre ces ajustements.

## Sélectionner le meilleur facteur de pondération

La courbe d'étalonnage trace les concentrations du standard par rapport à son aire ou sa hauteur de pic. Lorsque les points des standards sont tracés, déterminez le meilleur facteur de pondération pour ces points et indiquez-le dans la boîte de dialogue Specify Calibration. L'ajustement prédéfini est **None**, ce qui suppose que tous les points le long de la courbe aient la même importance. Sélectionnez l'un des types de pondération dans le tableau suivant. Pour plus d'informations, consultez la section [Facteurs de pondération](#).

Tableau 6-2 : Types de pondération

Weighting	Description
1/x	Utilisez un facteur de pondération de 1/x pour insister davantage sur les points de valeur plus faible.
1/x <sup>2</sup>	Utilisez une pondération de 1/x <sup>2</sup> pour insister davantage sur les points de valeur plus faible.
1/y	Utilisez un facteur de pondération de 1/y en cas d'étalonnage par aire (axe des ordonnées) plutôt que par concentration (axe des abscisses), et pour insister sur les points de valeur plus faible. Une pondération de 1/y est une variante de celle de 1/x, où y et x doivent être proportionnels l'un à l'autre.

Tableau 6-2 : Types de pondération (suite)

Weighting	Description
$1 / y^2$	Utilisez un facteur de pondération de $1/y^2$ lors d'un étalonnage par la surface (axe des ordonnées) plutôt que par la concentration (axe des abscisses) alors qu'un accent bien plus important doit être mis sur les points de moindre valeur. Une pondération de $1/y$ carré est une variante de $1/x$ carré, où $y$ et $x$ doivent être proportionnels l'un à l'autre.
$\ln x$	Utilisez le logarithme de $x$ pour mettre plus l'accent sur les points de valeur plus élevée.
$\ln y$	Utilisez le logarithme de $y$ pour mettre plus l'accent sur les points de valeur plus élevée. À utiliser lors de l'étalonnage par l'aire (axe des $y$ ) plutôt que par la concentration (axe des $x$ ).

## Algorithmes d'intégration

Le logiciel Analyst MD a deux algorithmes d'intégration : l'algorithme Analyst Classic original et l'algorithme IntelliQuan. L'algorithme IntelliQuan apporte une détection plus des pics et des fonctionnalités d'intégration plus cohérentes avec moins de paramètres à régler.

### Algorithmes d'intégration Analyst Classic et IntelliQuan

L'algorithme IntelliQuan emploie un des deux paramètres de détection des pics : Automatic IQA II qui est un réglage sans paramètre ou Specify Parameters MQ III. Après l'intégration des pics à l'aide de l'algorithme IntelliQuan, choisissez quel paramètre de détection des pics s'ajuste le mieux à l'ensemble de données. Ceci est fait dans les paramètres d'intégration des pics affichés dans la fenêtre ou le volet Peak Review.

Le tableau suivant indique les paramètres disponibles avec l'algorithme Analyst Classic.

Tableau 6-3 : Algorithme Analyst Classic

Paramètre	Définition
<b>Default Bunching Factor</b>	Nombre de points à intégrer dans une moyenne et à considérer comme un seul point dans le but de détecter les pics.
<b>Default Number of Smooths</b>	Nombre de fois où le chromatogramme est lissé.
<b>Default Void Volume Retention Time</b>	Tous les pics qui surviennent avant ce délai sont ignorés.
<b>Default Concentration Units</b>	Unités de concentration utilisées pour décrire la concentration de l'échantillon, par exemple pg/ $\mu$ l.

Tableau 6-3 : Algorithme Analyst Classic (suite)

Paramètre	Définition
<b>Default Calculated Concentration Units</b>	Unités de concentration utilisées pour décrire la concentration calculée de l'échantillon, par exemple pg/μl.
<b>Default RT Window</b>	Fenêtre temporelle centrée sur le temps de rétention attendu pour la détection des pics. Par exemple, une fenêtre temporelle de rétention de 30 secondes couvre 15 secondes supplémentaires avant et après le temps de rétention attendu.

Le tableau suivant indique les paramètres disponibles avec l'algorithme MQ III, pas avec l'algorithme IQA II.

Tableau 6-4 : Algorithme MQ III

Paramètre	Définition
<b>Default Noise Percentage</b>	Seuil utilisé en détection des pics. Seuls les pics supérieurs au pourcentage spécifié seront détectés.
<b>Default Baseline Subtraction Window</b>	Fenêtre temporelle autour de chaque point de données utilisée pour déterminer la hauteur de la correction de la ligne de base à appliquer à ce point. Cette fenêtre temporelle aide à la suppression du bruit excessif du chromatogramme. La ligne de base est définie comme la ligne reliant le point d'intensité minimum sur le côté gauche d'un point de données donné au point d'intensité minimum sur le côté droit à l'intérieur de la fenêtre spécifiée.
<b>Default Peak-Splitting Factor</b>	Contrôle si un groupe de pics donné est constitué de multiples pics adjacents ou d'un seul pic (potentiellement bruyant). Si le creux d'intensité est inférieur à la valeur spécifiée, un seul pic est signalé. Sinon, le point ayant l'intensité minimum dans le creux scinde le groupe en deux pics distincts. Le réglage d'un facteur important permet d'empêcher la scission des grappes en plus d'un pic.
<b>Default Void Volume Retention Time</b>	Tous les pics qui surviennent avant ce délai sont ignorés.
<b>Report Largest Peak</b>	La sélection de ce paramètre renvoie le pic le plus large dans la fenêtre des temps de rétention. Si ce paramètre n'est pas sélectionné, le pic le plus proche du temps de rétention attendu est trouvé. Le temps de rétention attendu est automatiquement calculé par l'assistant de quantification.

Le tableau suivant indique les paramètres utilisables avec les deux algorithmes IntelliQuan.

**Tableau 6-5 : Algorithme IntelliQuan pour IQA II et MQ III**

Paramètre	Définition
Default Minimum Peak Height	Hauteur minimum d'un pic nécessaire pour déclencher l'intégration.
Default Minimum Peak Width	Largeur minimum d'un pic nécessaire pour déclencher l'intégration.
Default RT Window	Spécifie la fenêtre temporelle centrée sur le temps de rétention attendu pour la détection des pics. Par exemple, une fenêtre temporelle de rétention de 30 secondes couvre 15 secondes supplémentaires avant et après le temps de rétention attendu.
Default Smoothing Width	Nombre des points utilisés dans le lissage des données.
Default Concentration Units	Unités de concentration utilisées pour décrire la concentration de l'échantillon, par exemple pg/µl.
Default Calculated Concentration Units	Unités de concentration utilisées pour décrire la concentration calculée de l'échantillon, par exemple pg/µl.

## Outils de création de méthode de quantification

Le logiciel offre quatre outils de création de méthode de quantification, chacun d'eux permettant de créer une méthode pleinement fonctionnelle. Le choix du meilleur outil dépend des tâches à accomplir.

Nous recommandons que seuls les utilisateurs compétents en développement de méthode créent ou modifient les méthodes d'acquisition et de quantification.

Pour plus d'informations sur les rôles et la sécurité, consultez la section *À propos des personnes et des rôles* dans le document *Guide du directeur de laboratoire*.

## Assistants

Les assistants de création de méthode disponibles sont Standard Quantitation et Automatic Quantitation. Les deux permettent à l'utilisateur de sélectionner le ou les lots à quantifier, de créer ou de sélectionner une méthode de quantification, puis d'intégrer les données de l'échantillon.

La différence entre les deux réside dans le type de méthode créée. L'assistant Standard Quantitation crée une méthode standard, alors que l'assistant Automatic Quantitation crée une méthode et génère automatiquement un tableau de résultats. Avec l'assistant Automatic Quantitation, les pics ne sont pas vérifiés lors de la création de la méthode. Cependant, ils peuvent encore être examinés après l'intégration.



Il n'y a qu'un seul cas fréquent lors duquel les pics n'ont pas besoin d'être vérifiés : lorsqu'une quantification n'est effectuée que pour intégrer et pas pour trouver des concentrations. Cela peut être nécessaire par exemple pour un lot qui contient différents composés dans chaque échantillon ou lorsque la masse n'est pas la même d'un échantillon à l'autre. Dans ce cas, utilisez l'assistant Automatic Quantitation. Sinon, pour procéder à une quantification, utilisez l'assistant Standard Quantitation.

Utilisez l'assistant Standard Quantitation après avoir acquis l'échantillon pour effectuer les opérations suivantes :

- choisir un échantillon représentatif,
- sélectionner les pics de l'analyte et du standard interne,
- ajuster les paramètres de recherche de pics et d'intégration,
- examiner les pics pendant la création de la méthode,
- sélectionner l'étalonnage.

Utilisez l'assistant Automatic Quantitation pour sélectionner un lot, créer une méthode (sans confirmation des pics) et intégrer les données de l'échantillon. Cet assistant est plus rapide que l'assistant Standard Quantitation et ne nécessite pas que les masses balayées soient les mêmes pour tous les échantillons. Cependant, il ne permet pas de sélectionner un standard interne, et tous les ions sont traités comme des analytes.

Utilisez l'assistant Automatic Quantitation après avoir acquis l'échantillon dans les cas suivants :

- Vous voulez sélectionner l'étalonnage.
- Vous ne voulez pas ajuster les paramètres de recherche de pics et d'intégration.
- Vous ne voulez pas sélectionner les noms des pics des analytes.
- Vous ne voulez aucun standard interne.
- Vous ne voulez pas examiner les pics pendant la création de la méthode, ni avoir différents composés dans chaque échantillon.

Lorsque les pics ne sont qu'intégrés, ils n'ont pas besoin d'être vérifiés, car aucun calcul de concentration n'est requis. Dans ce cas, utilisez l'assistant Automatic Quantitation qui vous permet d'examiner les pics après l'intégration.

### Trouver des pics à l'aide d'une méthode automatique

Le logiciel utilise le processus standard de détection des pics avec les exceptions suivantes :

- Il emploie le facteur de regroupement et le nombre de lissages (depuis l'assistant) tels quels.
- Il calcule le temps de rétention et les seuils de bruit et de surface attendus séparément pour chaque pic.

### Quantitation Method Editor

Utiliser cette option après avoir acquis l'échantillon pour effectuer les opérations suivantes :

## Analyse des données quantitatives

---

- ajuster les paramètres de recherche de pics et d'intégration,
- sélectionner les pics de l'analyte et du standard interne,
- sélectionner l'étalonnage.

Utiliser Quantitation Method Editor pour effectuer trois tâches supplémentaires :

- faire la somme des ions pour intégration,
- utiliser un standard interne issu d'une période ou d'une expérience différente (si le standard interne a été acquis au cours d'une période ou d'une expérience différente de celle de l'analyte),
- modifier une méthode existante.

## Semi-Automatic Method Editor

Le Semi-Automatic Quantitation Method Editor fait partie de Batch Editor. Utiliser Semi-Automatic Quantitation Method Editor pour sélectionner des informations de quantification, comme le type et la concentration de l'échantillon, avant l'acquisition des données. Cette préparation facilite la réalisation d'analyses quantitatives ultérieures. Sinon, une méthode complète peut être sélectionnée dans Batch Editor, qui est alors automatiquement appliquée à la fin du lot analysé pour générer le tableau de résultats de quantification.

Ne pas utiliser la méthode Quick Quant automatiquement générée pour réaliser la quantification si le paramètre Quick Quant est utilisé pour stocker des types d'échantillon et des concentrations dans le fichier de données. Cette méthode de quantification n'utilise pas de paramètres spécifiques au composé et à l'échantillon optimisés pour la sélection des pics.

Utiliser cette option dans les scénarios suivants :

- l'utilisateur n'a pas encore acquis d'échantillons en utilisant la même méthode d'acquisition,
- l'utilisateur veut sélectionner les noms et les masses pour les pics de l'analyte et du standard interne,
- l'utilisateur veut sélectionner les concentrations et les types d'échantillons dans l'onglet Quantitation de Batch Editor mais qu'il ne dispose d'aucune autre méthode de quantification,
- l'utilisateur veut éditer plus tard la méthode de quantification, si nécessaire.

## Trouver des pics à l'aide d'une méthode semi-automatique

Le logiciel utilise le processus standard de détection des pics avec les exceptions suivantes :

- Il emploie le facteur de regroupement (depuis la boîte de dialogue Options de Quantitation Method) et le nombre de lissages (depuis la boîte de dialogue Create Semi-Automatic Quantitation Method) tels quels.
- Il utilise le standard le plus concentré en tant qu'échantillon représentatif. Pour établir un temps de rétention, il utilise le pic le plus large de ce chromatogramme.

- Pour définir les seuils de bruit et de surface, il utilise le bruit de la ligne de base résultant. (Ce processus est identique aux modalités de détermination des valeurs prédéfinies pour les pics dans les méthodes normales.) Ces paramètres d'intégration sont appliqués à tous les autres échantillons.
- Si le lot examiné ne contient pas d'informations de quantification (type et concentrations de l'échantillon), le temps de rétention et les seuils sont calculés séparément pour tous les pics (comme pour les méthodes complètement automatiques).

## Parcelles métriques

Un tracé métrique illustre graphiquement les données contenues dans une colonne du tableau de résultats et tracées par rapport à l'axe des abscisses ou des ordonnées ; ou les données contenues dans deux colonnes tracées l'une par rapport à l'autre. Cette section décrit comment générer et utiliser les tracés métriques.

L'utilisateur trouvera également quelques tracés métriques prédéfinis :

- Int\_Std\_Response (pour trouver l'échantillon posant problème)
- Analyte\_Area versus Height (pour vérifier le comportement de la chromatographie)
- Profil PK (conc. par rapport au temps, à exécuter après la requête d'échantillon)

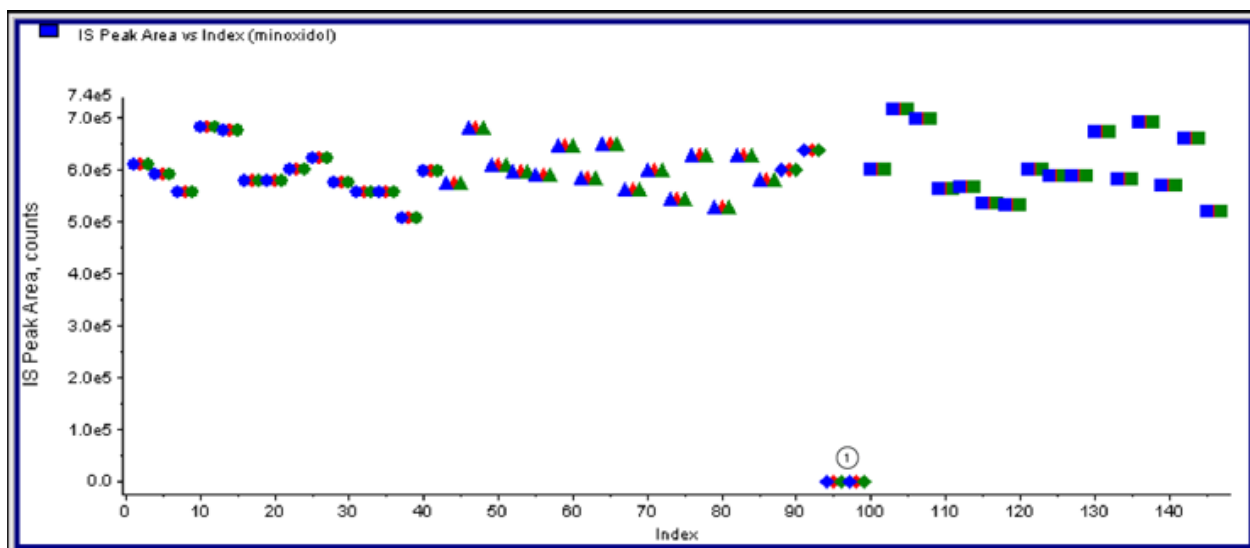
Utilisez les tracés métriques pour tracer une colonne telle que **Analyte Peak Area**, **Accuracy** ou **Calculated Concentration** à partir du tableau de résultats. Deux champs du tableau de résultats peuvent également être tracés l'un par rapport à l'autre. Les points affichés en dehors de la plage normale peuvent alors être examinés. Les tracés métriques sont souvent utilisés avec les requêtes. Pour plus d'informations sur les requêtes, consultez le document *Aide*.

Pour générer des tracés métriques, procédez comme suit :

- Utilisez le bouton **Plot** pour effectuer le tracé d'une ou plusieurs colonnes du tableau de résultats, sans enregistrer les critères de traçage.
- Créez un tracé spécifique du tableau pour enregistrer les critères avec le tableau actuel.
- Créez un tracé global pour enregistrer les critères de traçage à utiliser avec de prochains tableaux de résultats.

Les QC, les inconnus, les témoins, les doubles témoins ou les solvants ne s'affichent pas sur la courbe d'étalonnage, mais ils peuvent servir à générer des tracés métriques.

**Illustration 6-1 : Exemple de tracé métrique de l'aire du pic du standard interne en fonction de l'indice d'échantillon**



Élément	Description
1	Doubles témoins

## Générer un tracé métrique temporaire

- Effectuer l'une des opérations suivantes avec un tableau de résultats ouvert :
  - Pour tracer les données sur l'axe des ordonnées, l'axe des abscisses servant de référence, cliquer sur l'en-tête de la colonne des données à tracer.
  - Pour tracer les données à partir de la première colonne sélectionnée sur l'axe des abscisses et de la deuxième colonne sélectionnée sur l'axe des ordonnées, sélectionner deux colonnes en appuyant sur la touche Ctrl et en cliquant sur les en-têtes de colonnes.
- Au-dessus du tableau de résultats, cliquer sur l'icône **Metric Plot by Selection**. Le tracé métrique s'ouvre.
- Cliquer droit dans le volet du tracé, puis cliquer sur Data Legend pour afficher une explication des couleurs utilisées dans le tracé.
- Cliquer droit dans le volet du tracé, puis cliquer sur Point Legend pour afficher une explication des symboles utilisés dans le tracé.

## Générer un tracé métrique et enregistrer les critères de traçage

- Ouvrez un tableau de résultats approprié.
- Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats, puis cliquez sur **Metric Plot > New**.

Illustration 6-2 : Boîte de dialogue 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

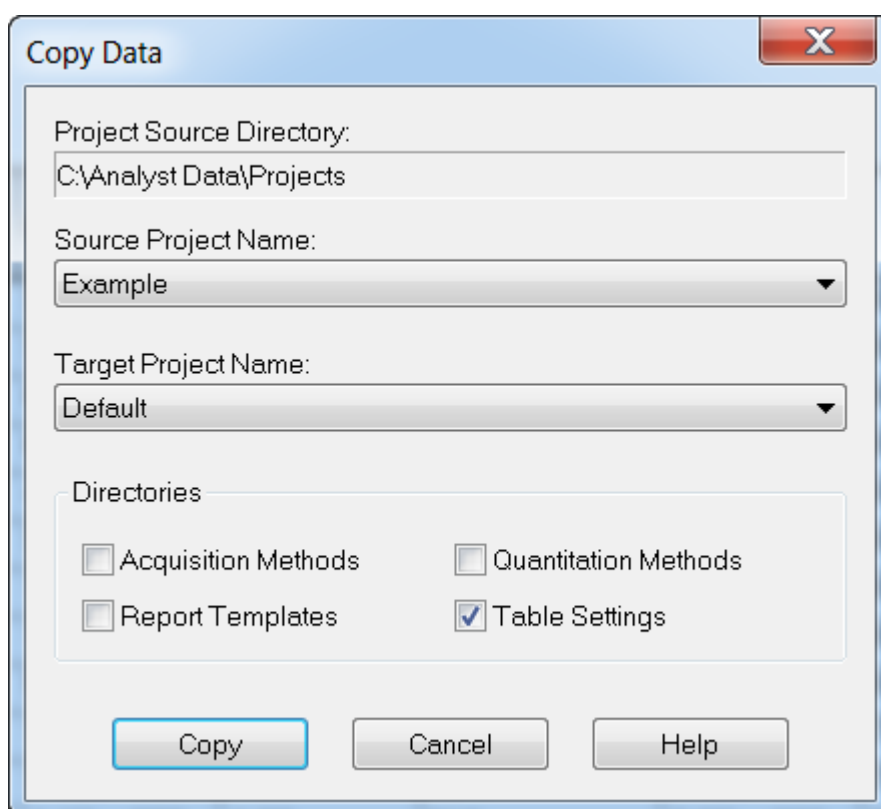
3. Dans le champ **Name**, saisissez le nom du nouveau critère de traçage.
  4. Dans le groupe X-Axis, dans la liste **Group**, sélectionnez **Index** puis laissez la liste **Column** vide pour tracer un champ en ordonnée et utiliser l'axe des abscisses comme un index.
  5. Au besoin, dans le groupe Y-axis, dans la liste **Group**, sélectionnez **Internal Standard**, puis dans la liste **Column**, sélectionnez **IS Peak Area** pour tracer deux colonnes l'une par rapport à l'autre.
  6. Le cas échéant, dans la liste **Regression**, sélectionnez le type de régression à utiliser puis les paramètres de régression appropriés.
  7. Pour générer le tracé et enregistrer les critères de traçage, cliquez sur **Save/Execute**. Le tracé métrique s'ouvre. Pour plus d'informations, consultez la figure ..
  8. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet du tracé, puis cliquez sur **Data Legend** pour afficher une explication des couleurs utilisées dans le tracé.
  9. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet du tracé, puis cliquez sur **Point Legend** pour afficher une explication des symboles utilisés sur le tracé.
- Cet ensemble de critères est désormais disponible pour les tracés futurs de ce tableau de résultats. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats pour accéder aux critères. Les critères de tracé peuvent également être modifiés.

10. Pour afficher l'échantillon posant problème, essayez de tracer la concentration de l'inconnu par rapport au temps ou de tracer la surface du standard interne par rapport à la référence.

## Enregistrer les critères de traçage par défaut pour les prochains tableaux de résultats

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Table Settings > Export To New Table Settings**.  
Ceci permet d'exporter les paramètres du tableau à partir du fichier rdb afin qu'ils puissent être réutilisés dans d'autres analyses de quantification au sein du projet.
2. Pour exporter les paramètres du tableau vers un autre projet, cliquer sur **Tools > Project > Copy Data**.

**Illustration 6-3 : Boîte de dialogue Copy Data**



## Paramètres Noise et Area Threshold

Pour identifier les pics, le logiciel a besoin d'un ensemble de paramètres seuils pour le bruit et l'aire. Le logiciel définit ces paramètres initialement, mais les utilisateurs peuvent les modifier ultérieurement. Le logiciel définit ces paramètres comme indiqué ci-après :

1. Le logiciel calcule la différence d'intensité la plus importante entre n'importe lesquels de deux points de données séquentiels. Ce nombre représente la différence entre deux intensités, pas l'intensité réelle elle-même.

2. Pour chaque paire séquentielle présentant une différence d'intensité inférieure à 5 % de la valeur calculée à l'étape 1, il calcule l'écart-type (en utilisant une moyenne nulle) des différences d'intensité. Le logiciel n'utilise pas les paires de points dont la différence d'intensité est supérieure à 5 % du maximum.
  - Le seuil de bruit est égal à l'écart-type calculé à l'étape 2.
  - Le seuil d'aire est égal à cinq fois le seuil de bruit.

---

**Remarque :** La valeur minimum pour les seuils de bruit et d'aire est de 0,000001. Si les calculs précédents ont produit une valeur inférieure à ce minimum, le logiciel réinitialise la valeur de ce seuil à 0,000001.

---

## Recalculer les seuils de bruit et de surface

Si une nouvelle aire de bruit de fond est définie, le logiciel recalcule alors les seuils de bruit et d'aire comme suit.

Pour chaque paire séquentielle de points de données, le logiciel calcule l'écart-type, en utilisant une moyenne nulle, des différences d'intensité. Le logiciel Analyst MD utilise tous les points de la plage sélectionnée, car il considère que l'aire sélectionnée est du bruit de fond.

- Le seuil de bruit est égal à l'écart-type calculé à partir de la plage sélectionnée.
- Le seuil d'aire est égal à cinq fois le seuil de bruit.

---

**Remarque :** La valeur minimum pour les seuils de bruit et d'aire est de 0,000001. Si les calculs précédents ont produit une valeur inférieure à ce minimum, le logiciel réinitialise la valeur de ce seuil à 0,000001.

---

## Intégration des pics

Ci-après les types d'intégration par lesquels la référence a été trouvée et intégrée au moment où le pic a été trouvé.

- **Manual :** le pic a été manuellement intégré par l'utilisateur.
- **Automatic :** le pic a été automatiquement intégré comme suit :
  - **Baseline-to-baseline :** la surface du pic est définie par les lignes verticales au début et à la fin du pic qui s'étendent jusqu'à la référence. Ce type d'intégration n'est possible que pour les pics qui ne présentent pas d'autre pic qui les précède ou qui les suit immédiatement.
  - **Valley :** même type que référence à référence, sauf qu'il s'applique uniquement aux pics présentant un autre pic qui les précède ou qui les suit immédiatement.
  - **Exponential Skim :** dans un filtrage exponentiel, la surface du pic est celle du pic principal ou du pic parent.
  - **Exponential Child :** la surface du pic est celle du pic secondaire se traduisant par un filtrage exponentiel.

## Examen des pics

Pendant l'examen des pics, les utilisateurs peuvent explorer les pics que le logiciel a sélectionnés, puis redéfinir le pic ou les points de départ et de fin si nécessaire.

En général, le logiciel est expert pour identifier précisément les pics de l'analyte et du standard interne. Pour diverses raisons, y compris la définition de la méthode d'acquisition d'échantillons et de quantification, le logiciel manque parfois le pic correct, choisit le mauvais ou ne parvient pas du tout à localiser le pic. Dans d'autres circonstances, bien que le logiciel puisse identifier correctement le pic, les utilisateurs peuvent ne pas être d'accord avec les points de départ et de fin sélectionnés.

## Conseils pour l'examen des pics

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Intégration des pics : pour examiner les pics	<p>Pour examiner tous les pics, assurez-vous que tous les échantillons sont répertoriés dans le tableau de résultats.</p> <p>La fenêtre Peak Review contient les pics répertoriés dans le tableau de résultats. Si certains échantillons sont masqués dans le tableau (par exemple, si une requête est appliquée), ils sont alors également masqués dans la fenêtre Peak Review.</p>
Intégration des pics : pour accéder au premier pic du lot	<p>Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le volet Peak Review, puis cliquez sur <b>Show First Page</b>. Pour accéder au dernier pic du lot, cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le volet Peak Review, puis cliquez sur <b>Show Last Page</b>.</p>

## Détecter les pics

Le logiciel détecte les pics en quatre stades.

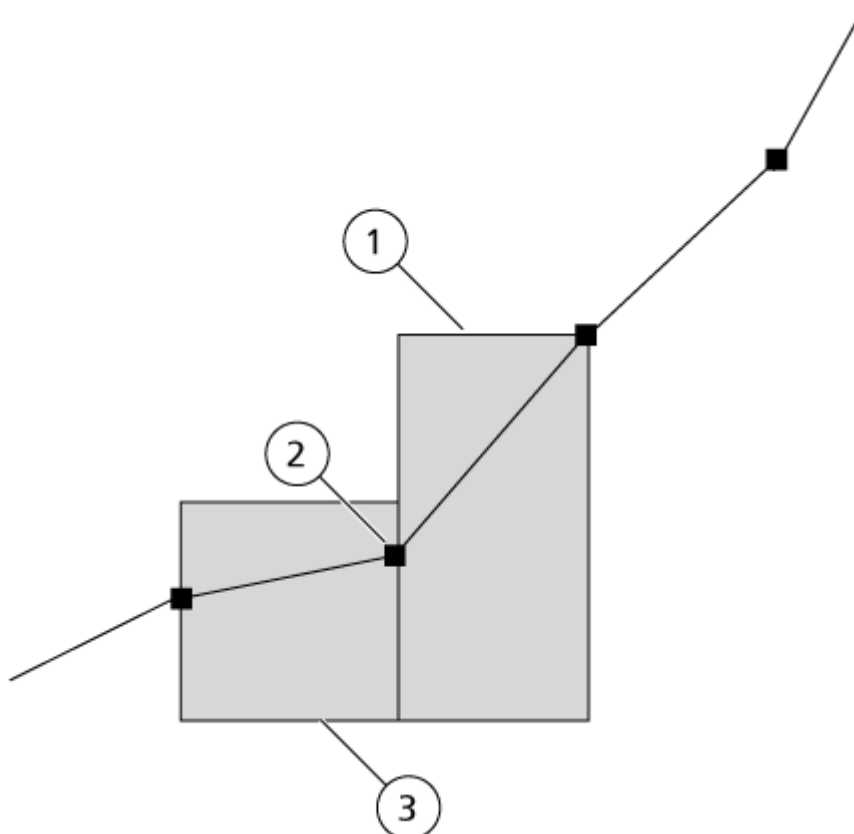
1. Il détecte le début de pic potentiel en examinant la distance entre chaque point regroupé et celui qui le précède. Quand cette distance dépasse le seuil de bruit en cours, un point de début potentiel a été détecté.
2. Il confirme le début du pic en s'assurant qu'il existe suffisamment de points sur une ligne pour dépasser le seuil d'aire.
3. Il détecte le haut du pic en cherchant un point inférieur au point qui le précède.
4. Il détecte la fin du pic en identifiant l'endroit où la distance entre un point regroupé et celui qui le suit passe au-dessous du seuil de bruit. Si nécessaire, il sépare les pics.



## Trouver le début potentiel du pic

Pour détecter le début potentiel d'un pic, le logiciel mesure la différence d'intensité entre deux paires séquentielles de points regroupés en commençant au premier point. Quand il trouve une différence qui dépasse le seuil de bruit en cours, il déclare le premier point comme étant le début potentiel du pic.

**Illustration 6-4 : Trouver le début potentiel du pic**



Élément	Description
1	Dépasse le seuil de bruit
2	Début potentiel du pic
3	Ne dépasse pas le seuil de bruit

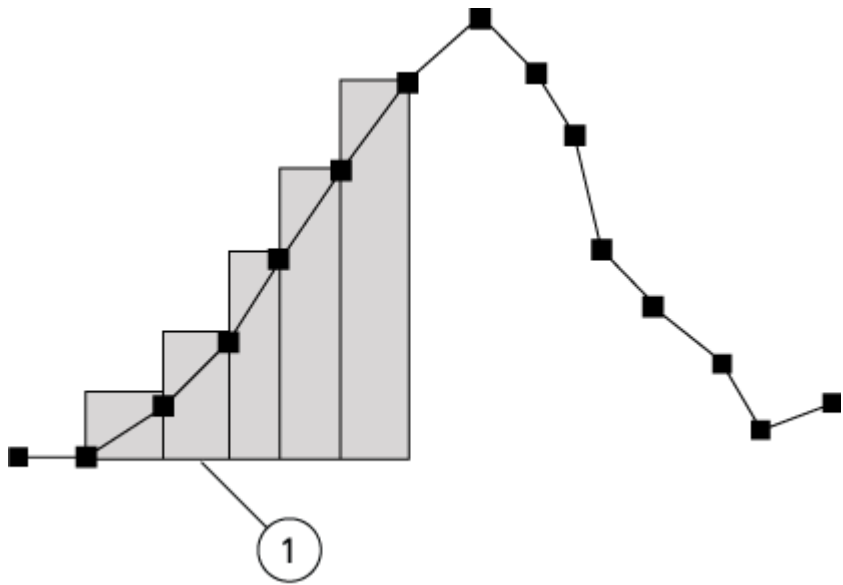
## Confirmer le début du pic

Pour s'assurer qu'il a détecté un pic réel, le logiciel se déplace le long de la courbe en ajoutant la différence entre l'intensité de chaque point de données regroupé et l'intensité au début potentiel du pic pour obtenir une somme totale. Ce processus s'arrête quand la différence d'intensité entre points successifs est inférieure au seuil de bruit. Cette somme constitue une approximation de l'aire du front du pic. Si la somme dépasse le seuil d'aire, le logiciel confirme le début du pic.

Analyse des données quantitatives

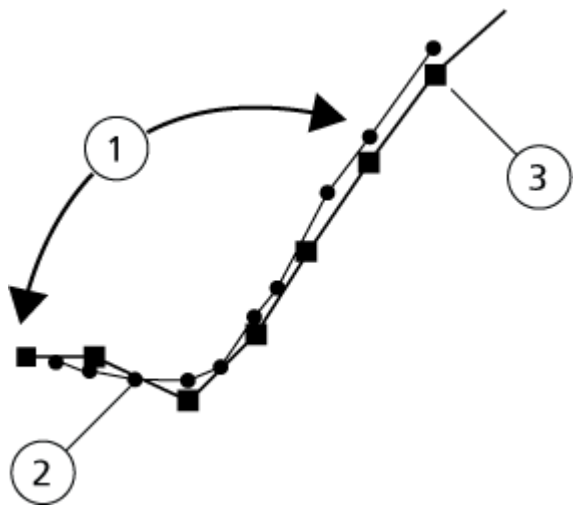
Ensuite, le logiciel détermine le début réel du pic en se déplaçant en arrière depuis le début potentiel du pic jusqu'à ce qu'il détecte le point le plus bas du pic. Il se déplace en arrière sur cinq regroupements de donnée brutes. Ce point est le début réel du pic.

Illustration 6-5 : Confirmer le début du pic



Élément	Description
1	La somme des coupes de l'aire est supérieure au seuil d'aire

Illustration 6-6 : Confirmer le début réel du pic



Élément	Description
1	Examiner les points de données de cette zone
2	Point de données minimum

Élément	Description
3	Début potentiel du pic

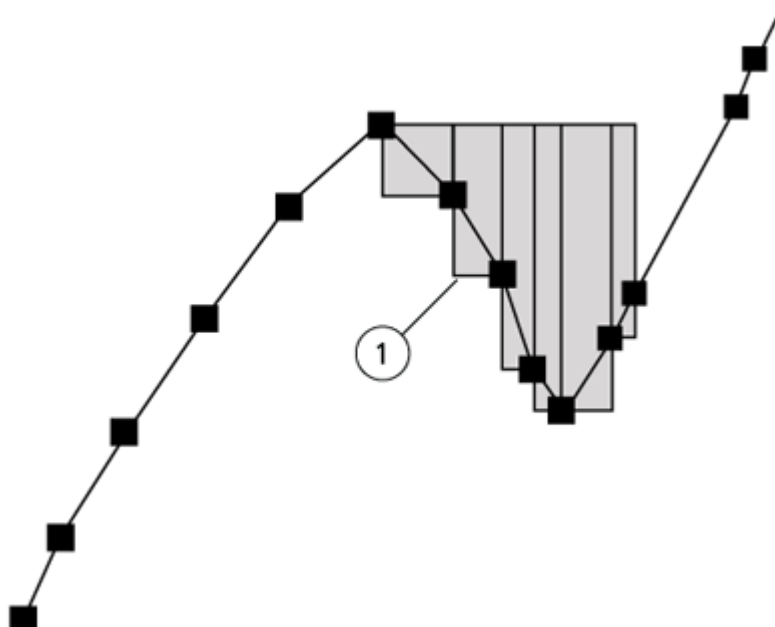
## Trouver le sommet du pic

Pour trouver le sommet du pic, le logiciel examine tout d'abord un point qui se trouve plus bas que le point précédent. Puis, pour confirmer qu'il a bien trouvé le sommet, il fait la somme des différences d'intensité entre le sommet potentiel et les points regroupés ultérieurs jusqu'à ce qu'il atteigne la fin du pic. Si la distance totale entre les points dépasse les deux tiers du seuil d'aire, le sommet du pic est confirmé. C'est-à-dire que le logiciel vérifie d'abord qu'il a un pic, puis il revient en arrière pour en trouver le sommet.

Cependant, s'il trouve un point regroupé plus élevé avant que le test d'aire n'ait été réussi, il identifie un nouveau point haut et relance le test d'aire.

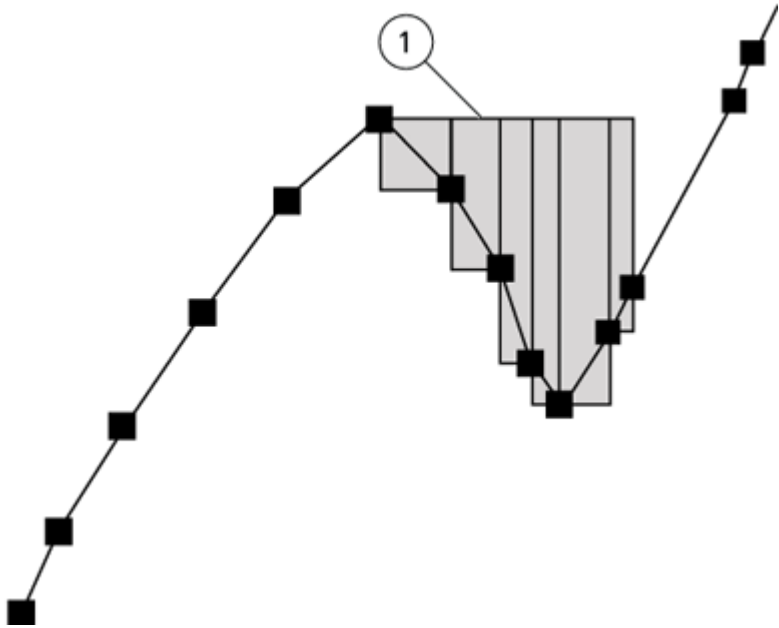
**Remarque :** Le temps de rétention réel d'un pic n'est pas simplement le point identifié décrit précédemment. Il est plutôt déterminé à partir d'un ajustement quadratique basé sur les trois points de données les plus élevés.

### Illustration 6-7 : Trouver le sommet du pic



Élément	Description
1	La somme des coupes de l'aire est supérieure aux deux tiers du seuil d'aire.

Illustration 6-8 : Identifier un nouveau sommet du pic



Élément	Description
1	L'épaulement présente un maximum, mais l'aire cumulée de la crête n'est pas supérieure aux deux tiers du seuil d'aire.

## Trouver la fin du pic

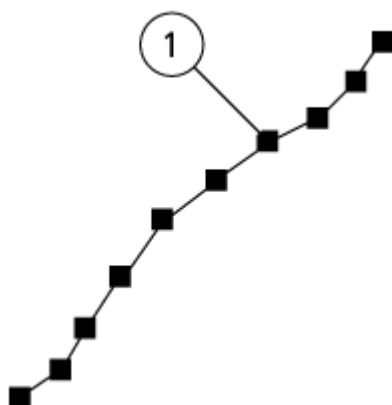
Le logiciel déclare un point de fin de pic quand l'une des conditions suivantes est remplie :

- La différence entre deux points consécutifs échoue au test du seuil de bruit.
- Le logiciel détecte le début d'un autre pic.

Dans les deux cas, le point regroupé le moins élevé des cinq derniers groupes est considéré comme étant le point de fin réel du pic.

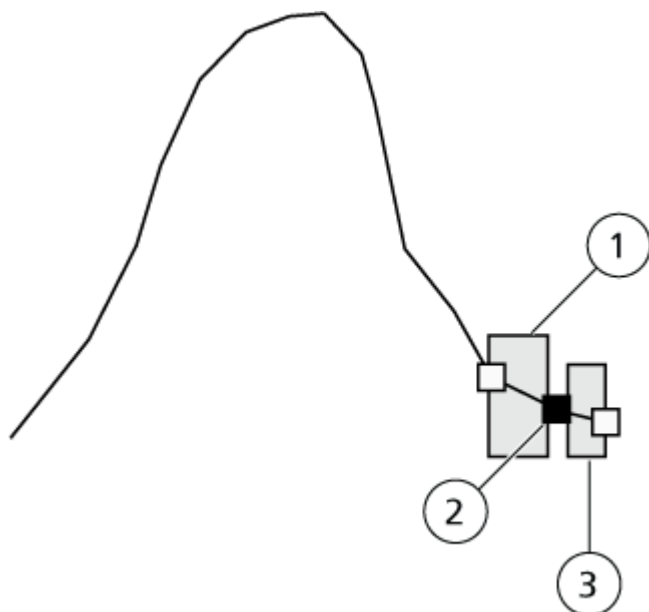
En général, le logiciel détecte plusieurs pics pour chaque chromatogramme. Le pic qu'il sélectionne est l'un de ceux dont le temps de rétention est le plus proche du temps de rétention attendu spécifié dans la méthode. Si aucun pic n'a un temps de rétention conforme aux spécifications, le logiciel indique qu'aucun pic n'a été trouvé.

### Illustration 6-9 : Trouver des pics



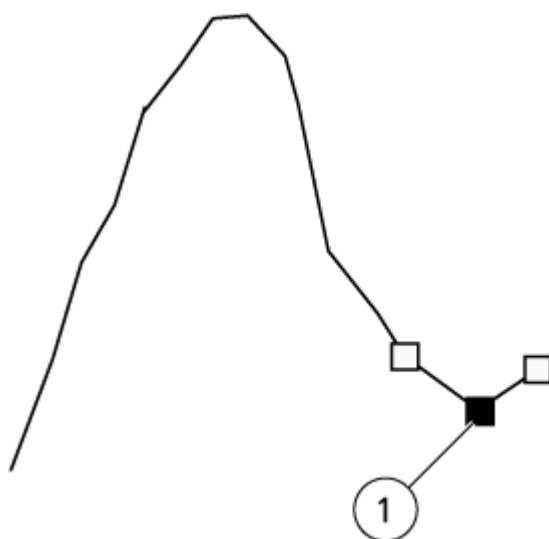
Élément	Description
1	L'épaulement ne présente pas de point maximum distinct

**Illustration 6-10 : Trouver la fin du pic : cas 1**



Élément	Description
1	Dépasse le seuil de bruit
2	Fin du pic
3	Ne dépasse pas le seuil de bruit

**Illustration 6-11 : Trouver la fin du pic : cas 2**



Élément	Description
1	Fin du pic

## Pics distincts

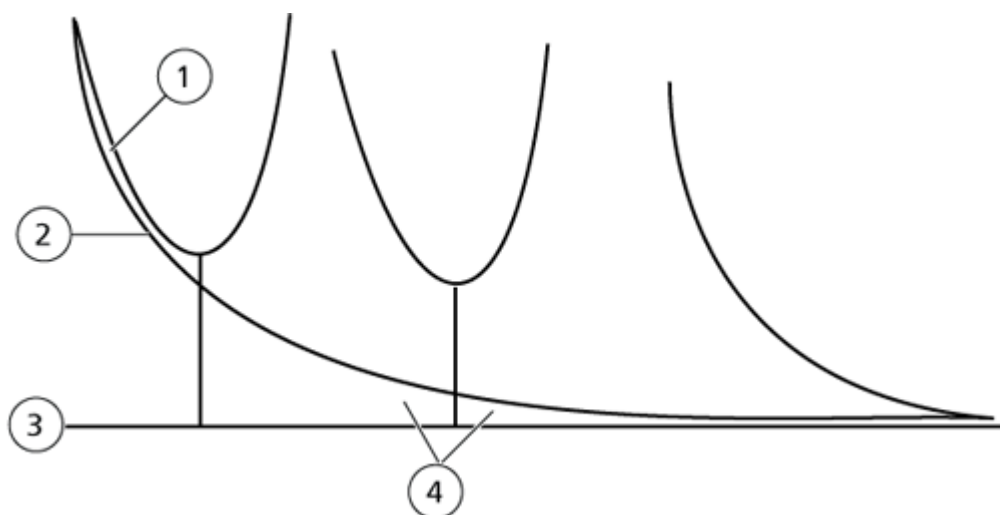
Si un nouveau pic commence avant que le pic actuel ne touche la ligne de base, le logiciel décide, en se fondant sur les critères suivants, s'il faut résoudre la ligne de base en utilisant les filtrages exponentiels. Le filtrage passe au-dessous d'un ou de plusieurs des pics qui suivent le précurseur. Ces pics sont appelés pics produits.

Quand le logiciel exécute un filtrage exponentiel, il soustrait l'aire qui se trouve au-dessous du filtrage des pics produits et l'attribue au pic précurseur. Ensuite, il soustrait du pic précurseur la petite aire au-dessous du filtrage et l'ajoute au premier pic produit.

Le logiciel utilise les critères suivants pour déterminer s'il va utiliser le filtrage exponentiel :

- Rapport de pic exponentiel
- Rapport exponentiel ajusté
- Rapport de vallée exponentiel

**Illustration 6-12 : Pics distincts : un filtrage exponentiel**



Élément	Description
1	Cette aire est soustraite du pic précurseur et ajoutée au premier pic produit.
2	Filtrage exponentiel
3	Ligne de base du groupement
4	Ces aires sont soustraites des pics produits et ajoutées aux pics précurseurs.

## Requêtes

Une requête permet de sélectionner uniquement les enregistrements qui répondent à certains critères. Les utilisateurs peuvent utiliser des requêtes pour afficher des parties spécifiques des données qui les intéressent dans le tableau de résultats sur la base

de sélections textuelles ou mathématiques. Une requête enregistrée dans un projet est disponible pour tous les tableaux de résultats à l'intérieur de ce projet.

Lorsqu'une requête est utilisée, le tableau affiche uniquement les lignes de données qui répondent aux critères sélectionnés. Toutes les colonnes sont affichées. Les sélections peuvent être affinées davantage en exécutant une deuxième requête sur les lignes affichées par la première requête.

Utiliser des choix prédéfinis et taper des entrées pour créer une requête qui peut être exécutée, enregistrée ou modifiée. Chaque ligne de la requête fonctionne comme une recherche booléenne qui s'exécute sur les colonnes du tableau de résultats afin de déterminer les enregistrements qui doivent être affichés. Chaque ligne de la requête ne sélectionne que les enregistrements à afficher qui répondent à ses critères. Une requête prédéfinie ou spécifique à un tableau peut être définie.

Nous recommandons à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.

### Requêtes sur le type d'échantillon

Pour une requête conçue pour sélectionner uniquement le type d'échantillon de standard, le tableau de résultats n'affiche que les lignes de données qui contiennent Standard dans la colonne Sample Type.

### Requêtes par défaut et requêtes spécifiques à un tableau

Une requête par défaut est généralement utilisée pour identifier les échantillons qui ne répondent pas à certains critères. Une requête spécifique à un tableau est généralement utilisée pour identifier les enregistrements qui répondent à certains critères.

La requête par défaut est généralement utilisée pour trouver les problèmes liés au contrôle qualité ou aux standards. Si la concentration et la variation maximum des QC et des standards sont sélectionnées dans l'assistant Quantitation Method, alors le tableau de résultats n'affichera que les échantillons qui se trouvent à l'extérieur de cette plage. Si le tableau de résultats n'affiche rien, alors les échantillons sont corrects. Si la case Execute Query as Standard Query a été cochée, tous les échantillons du tableau de résultats sont affichés, mais l'état Fail ou Pass est indiqué dans la colonne Standard Query Status selon que les échantillons ont échoué à la requête ou l'ont réussie.

Les requêtes spécifiques à un tableau sont exécutées sur un tableau de résultats affiché afin de sélectionner les enregistrements qui répondent à certains critères. Concevez ces requêtes à l'aide du menu qui s'affiche lorsque vous cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau. Enregistrez et exportez une requête afin de la rendre disponible pour de futurs tableaux de résultats.

### Paramètres globaux ou spécifiques à un tableau

Si l'utilisateur travaille avec des options de paramétrage d'un tableau, les procédures peuvent être spécifiques à un tableau ou globales.

- **Paramètres spécifiques à un tableau** : lorsque les paramètres d'un tableau sont modifiés sur le tableau lui-même, les modifications apportées aux paramètres sont



disponibles uniquement pour ce tableau. Il est cependant possible de les exporter en tant que paramètres globaux.

- **Paramètres globaux** : la modification des paramètres globaux implique d'apporter des modifications à un groupe de paramètres qui peuvent être appliqués à de futurs tableaux de résultats. Pour personnaliser un tableau de résultats en cours de création, choisissez un groupe de paramètres sur la page Create Quantitation Set: Select Settings & Query. Si aucun groupe de paramètres n'est sélectionné, le logiciel utilise automatiquement les paramètres prédéfinis.

## Comment les variations de la précision affectent les résultats

Pour les requêtes prédéfinies, la précision est exprimée en pourcentage et mise en place sous la forme de plus ou moins ce nombre. Par exemple, si 10 est saisi pour **Maximum Variation for standards** dans la boîte de dialogue Create Default Query, tous les enregistrements contenant des standards dont la précision est hors de la plage 90-110 % sont affichés dans le tableau de résultats. Avec une valeur de 5, seuls les standards dont la précision est inférieure à 95 % et supérieure à 105 % sont affichés dans le tableau de résultats. Consultez la section [Tableaux de résultats](#).

## Équations de régression

Cette section décrit les équations utilisées pour calculer les courbes de régression. Dans les équations suivantes,  $x$  représente la concentration de l'analyte pour les échantillons standard et  $y$  représente l'aire ou l'amplitude de pic correspondante. Les variables exactes utilisées pour la régression dépendent de l'utilisation ou non d'une standard interne et de l'utilisation de l'aire ou de l'amplitude du pic, comme illustré dans le tableau suivant.

**Tableau 6-6 : Variables de régression**

Étalon interne utilisé ?	Surface utilisée ?	$x$	$y$
Oui	Oui	$C_a / C_{est} / DF$	$A_a / A_{est}$
Oui	Non	$C_a / C_{est} / DF$	$H_a / H_{est}$
Non	Oui	$C_a / DF$	$A_a$
Non	Non	$C_a / DF$	$H_a$

où :

- $C_a$  = concentration réelle en analyte
- $C_{est}$  = concentration du standard interne
- DF = facteur de dilution
- $A_a$  = aire du pic de l'analyte
- $A_{est}$  = aire du pic du standard interne

- $H_a$  = amplitude du pic de l'analyte
- $H_{est}$  = amplitude du pic du standard interne

## Options d'ajustement

L'ajustement indique le type d'analyse de régression à appliquer aux données. Les diverses options d'ajustement sont les suivantes : linéaire, linéaire passant par l'origine, facteur de réponse moyen, puissance et quadratique.

### Linear Regression

La régression linéaire suppose que les points du standard constituent une ligne droite.

L'équation d'étalonnage linéaire est la suivante :

$$y = mx + b$$

La pente et l'interception sont calculées comme suit :

$$m = (\sum w \sum wx y - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

où :

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

### Linéaire passant par l'origine

La régression linéaire passant par l'origine suppose que les points de la standard constituent une ligne droite et que cette ligne de points s'aligne sur l'origine des axes des abscisses et des ordonnées. Utilisez ce paramètre pour forcer la ligne à passer par l'origine.

L'équation d'étalonnage linéaire passant par l'origine est la suivante :

$$y = mx$$

La pente est calculée comme suit :

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

### Facteur de réponse moyen

L'étalonnage avec le facteur de réponse moyen est le suivant :

$$y = mx$$

Il s'agit de la même équation que dans le cas de l'étalonnage linéaire passant par l'origine. Cependant, la pente est calculée de façon différente comme suit :

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

L'écart-type du facteur de réponse est calculé comme suit :

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1))} / \sum w$$

où :

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

---

**Remarque :** Les points ayant zéro pour valeur x sont exclus des sommes.

---

Si la ligne de points présente certaines zones linéaires et certaines zones courbes, utilisez alors la régression de puissance plutôt que la régression linéaire ou la régression quadratique pour obtenir une ligne quelque part entre ces ajustements.

## Puissance

L'équation d'étalonnage de la fonction de puissance est la suivante :

$$y = ax^p$$

Les équations d'étalonnage linéaire sont utilisées comme décrit ci-dessus pour calculer la pente (m) et l'ordonnée (b), excepté que dans ces équations, x est remplacé par ln x et y est remplacé par ln y. Une fois cela effectué, a et p sont calculés comme suit :

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Si l'une des valeurs x- ou y- est négative ou est égale à zéro, une erreur est alors communiquée.

## Quadratique

L'équation d'étalonnage quadratique est la suivante :

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Les coefficients polynomiaux sont calculés comme suit :

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

où :

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

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

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

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

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

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

## Facteurs de pondération

Le tableau suivant montre comment le facteur de pondération (w) est calculé pour chacun des sept types de pondération.

**Tableau 6-7 : Facteurs de pondération**

Weighting Type	Poids (w)
Aucune	Toujours 1.0.
1 / x	Si $ x  < 10^{-5}$ , alors $w = 10^5$ . Sinon, $w = 1 /  x $ .
1 / x <sup>2</sup>	Si $ x  < 10^{-5}$ , alors $w = 10^{10}$ . Sinon, $w = 1 / x^2$ .
1 / y	Si $ y  < 10^{-8}$ , alors $w = 10^8$ . Sinon, $w = 1 /  y $ .
1 / y <sup>2</sup>	Si $ y  < 10^{-8}$ , alors $w = 10^{16}$ . Sinon, $w = 1 / y^2$ .
ln (x)	Si $x < 0$ , alors une erreur est générée. Si $x < 10^{-5}$ , alors $w = \ln 10^5$ . Sinon $w =  \ln (x) $ .
ln (y)	Si $y < 0$ , alors une erreur est générée. Si $y < 10^{-8}$ , alors $w = \ln 10^8$ . Sinon $w =  \ln (y) $ .

## Modèles de rapport

Cette section décrit les divers éléments utilisés dans les modèles de rapport qui sont créés à l'aide de **Report Template Editor**, dans la section **Configurer** de la barre de navigation du logiciel Analyst MD.

Les informations suivantes peuvent être ajoutées aux en-têtes et aux pieds de page des rapports.

---

**Remarque** : Créez une sauvegarde des modèles de rapport avant de les modifier.

---

**Tableau 6-8 : Éléments de conception de base**

Élément	Définition
Printing Date	(Date d'impression) Date d'impression du document.

Tableau 6-8 : Éléments de conception de base (suite)

Élément	Définition
<b>Printing Time</b>	(Heure d'impression) Heure d'impression du document.
<b>Operator</b>	(Opérateur) Opérateur qui a imprimé le document.
<b>Workstation</b>	(Poste de travail) Poste de travail sur lequel le document a été imprimé.
<b>Page n of N</b>	(Page n/N) Numéro de la page et nombre total de pages.
<b>Custom Field</b>	(Champ personnalisé) Saisissez votre texte dans ce champ.
<b>Analyst Version</b>	(Version d'Analyst) Version du logiciel Analyst MD.
<b>User Type</b>	(Type d'utilisateur) Type d'utilisateur (sécurité).
<b>Electronic Signature</b>	(Signature électronique) Indique si la fonction de signature électronique (sécurité) est activée ou désactivée.

Tableau 6-9 : Éléments d'acquisition

Élément	Définition
<b>Acquisition File</b>	Nom du fichier de données contenant les informations sur l'acquisition de l'échantillon.
<b>Acquisition Date</b>	Date d'acquisition de l'échantillon.
<b>Acquisition Time</b>	Heure d'acquisition de l'échantillon.
<b>Operator</b>	Nom de l'opérateur qui a traité le lot d'échantillons.
<b>Batch Name</b>	Nom du lot.
<b>Sample Number</b>	Numéro de l'échantillon.
<b>Sample Name</b>	Nom de l'échantillon.
<b>Sample Comment</b>	Commentaire sur l'échantillon saisi dans Acquisition Method Editor.
<b>Sample ID</b>	Numéro d'identification de l'échantillon.
<b>Scan Mode</b>	Méthode selon laquelle le système calcule les points de masse d'un balayage pendant un balayage complet de la plage de masses.

Tableau 6-9 : Éléments d'acquisition (suite)

Élément	Définition
Scan Type and Polarity	Type de balayage d'acquisition (Q1, Q3, MRM, ion produit, ion précurseur, perte/gain de neutre) et polarité de la méthode d'acquisition (positive ou négative).
Scan Mass(es)	Ions ou fragments d'ions à balayer.
Dwell Time	Temps nécessaire au système pour balayer une masse particulière.
Pause Time	Pause entre le balayage de plages de masses ou entre des expériences.
Ion Energy	L'énergie ionique provient de la méthode d'acquisition et est liée à la tension de la source d'ions IonSpray ou à l'énergie de collision.
Collision Energy	L'énergie de collision provient de la méthode d'acquisition et est liée à la tension de la source d'ions IonSpray.
Period and Experiment	Une période contient plusieurs expériences. Une expérience contient plusieurs propriétés comme <b>Scan Type</b> , <b>Scan Mode</b> , <b>Resolution</b> , <b>Ion Source Parameters</b> et plusieurs masses ou plages de masses.
State Table Parameters	Paramètres du spectromètre de masse utilisés au cours de l'expérience.
Pump	Nom de la pompe utilisée pendant l'expérience.
Autosampler	Nom de l'auto-échantillonneur utilisé pendant l'expérience.
Custom Annotation	Texte personnalisé ajouté via Batch Editor.
Collected By	Nom de la personne qui a recueilli les données.

Tableau 6-10 : Éléments de quantification

Élément	Définition
Results Table Name	Nom du tableau de résultats.
Results Table Path	Emplacement du tableau de résultats.
Method Name	Nom de la méthode de quantification.
Method Path	Emplacement du fichier de la méthode.

Tableau 6-10 : Éléments de quantification (suite)

Élément	Définition
Project Name	Nom du projet.

## Rapports personnalisés

Report Template Editor permet de personnaliser les rapports en configurant les en-têtes, les pieds de page et les mises en page. Utiliser des modèles de rapport avec sortie imprimée et exportation des données vers une autre application.

La sortie imprimée comporte plusieurs types d'éléments :

- **Fenêtre** : les fenêtres s'ouvrent dans la zone de travail de la fenêtre du logiciel, au-dessous de la barre d'outils et à droite de la barre de navigation. L'impression d'une fenêtre imprime tout ce qui est affiché dans cet espace.
- **Volet** : les volets sont des parties d'une fenêtre disposées de telle sorte qu'elles ne se chevauchent pas et sont toujours complètement visibles. Par exemple, la fenêtre Method Editor contient deux volets : le volet Browser et le volet Method Editor. Les utilisateurs peuvent imprimer les informations depuis chaque volet de la fenêtre.
- **Rapport** : les rapports sont des ensembles structurés d'informations créés dans le logiciel. Certains rapports peuvent être directement imprimés, comme les rapports d'étalonnage. D'autres informations doivent être exportées, comme les lots et les tableaux de résultats de quantification.

## Aperçu, impression et exportation des rapports

Les méthodes d'acquisition, les lots, les tableaux de résultats de quantification et les tableaux de résultats graphiques peuvent être exportés sous forme de rapports. D'autres formes d'informations comme des données du calculateur peuvent être exportées, mais elles ne peuvent pas être personnalisées avec un modèle de rapport.

La plupart des zones affichées sur l'écran peuvent être imprimées. Les utilisateurs peuvent afficher un aperçu, mettre à l'échelle ou copier des graphiques à l'aide de la fonction Print Preview.

Un rapport exporté est enregistré sous un format de fichier approprié pour des programmes comme Bloc-notes, Microsoft Word, Excel ou un logiciel LIMS (système de gestion des informations du laboratoire).

Exportez les rapports dans les formats suivants :

- csv
- doc
- pdf
- txt

## Analyse des données quantitatives

---

Les formats disponibles dépendent des informations à exporter. Par exemple, un graphique peut être exporté en tant que pdf. Un tableau de données peut être exporté en tant que fichier txt.

Pour inclure des informations supplémentaires dans l'en-tête et le pied de page du rapport, imprimez ce dernier en utilisant un modèle de rapport approprié.

**Tableau 6-11 : Aperçu, impression et exportation des rapports**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Afficher un aperçu d'un graphique	Cliquez sur <b>File &gt; Print Preview &gt; Pane..</b>
Imprimer un rapport sans modèle	Cliquez sur <b>File &gt; Print</b> puis sur le rapport à imprimer.
Imprimer un rapport avec un modèle	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Cliquez sur <b>File &gt; Print &amp; Report Setup..</b></li><li>2. Dans la section <b>Report Template</b>, sélectionnez le modèle à utiliser, puis cliquez sur <b>OK..</b></li></ol>
Pour exporter un rapport	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Cliquez sur <b>File &gt; Export..</b></li><li>2. Dans le champ <b>File</b>, saisissez le nom du fichier.</li><li>3. Dans la liste <b>Save as type</b>, sélectionnez le type de fichier.</li><li>4. En cas d'exportation d'un rapport en mode Quantitate, sélectionnez <b>All Columns</b> ou <b>Visible Columns</b> dans la section <b>Export</b>, puis cliquez sur <b>Save</b>.</li></ol>

## Tableaux de résultats

Les tableaux de résultats résument les concentrations calculées de l'analyte dans chaque échantillon inconnu en se basant sur la courbe d'étalonnage. Ils comportent aussi les courbes d'étalonnage et les statistiques des résultats.

Exportez les données d'un tableau de résultats vers un fichier txt pour les utiliser dans d'autres applications comme Microsoft Excel. Toutes les données possibles du tableau ou uniquement celles qui se trouvent dans les colonnes visibles peuvent être exportées.

---

**Remarque :** Nous recommandons aux utilisateurs d'utiliser uniquement les méthodes contrôlées comme l'exportation de tableaux de résultats et la génération de rapport pour l'extraction de données à partir du logiciel Analyst MD. Les autres sources d'extraction de données comme la copie depuis les tableaux de résultats et le collage ne sont pas contrôlées et ne doivent pas être utilisées.

---

Les données d'un tableau de résultats peuvent être triées de trois manières différentes :

- Triez rapidement le tableau sur une à trois colonnes à l'aide de l'un des boutons **Sort**. Ce critère de tri ne peut pas être enregistré.



- Créez un tri spécifique du tableau pour enregistrer les critères de tri avec le tableau actuel. Les tris spécifiques permettent de trier le tableau actuel sur une à trois colonnes et d'enregistrer le critère à utiliser avec ce tableau.
- Utilisez un tri prédéfini déjà créé. Créez et enregistrez un tri, puis appliquez-le à un tableau de résultats.

**Conseil !** Pour enregistrer un tri ou un autre paramétrage de tableau, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau, puis cliquez sur **Table Settings > Export To New Table Settings**.. Le tri et les autres paramètres peuvent être utilisés dans le projet courant. Pour utiliser les paramètres de tableau dans un autre projet, copiez-les dans ce projet en cliquant sur **Tools > Project > Copy Data**.. Sélectionnez un nom dans **Source Project Name** et **Target Project Name**, cochez la case de **Table Settings** sous Directories, puis cliquez sur **Copy**. Si les paramètres **Table Settings** doivent être utilisés dans un nouveau projet, ce dernier doit être créé avant de copier les paramètres **Table Settings**.

## Afficher une disposition spécifique des tableaux de résultats

La vue par défaut des tableaux de résultats est la vue Full Layout ou Summary Layout. S'il y a plusieurs analytes par échantillon, chacun d'eux peut être affiché dans la vue Analyte Layout.

Lorsqu'un tableau de résultats est ouvert et actif, cliquez dessus avec le bouton droit de la souris, puis cliquez sur l'un des champs suivants :

**Tableau 6-12 : Dispositions du tableau de résultats**

Champ	Description
<b>Full</b>	Cliquez sur pour afficher la vue Full Layout.
<b>Summary</b>	Cliquez sur un nom de champ.
<b>Analyte</b>	Cliquez sur un analyte pour afficher la vue Analyte Layout. Lorsque des résultats d'algorithme MRM ou <i>Scheduled</i> MRM, les utilisateurs peuvent cliquer sur <b>Analyte</b> pour afficher une liste des ID de composé.
<b>Analyte Group</b>	<p>Cliquez sur un groupe d'analytes pour afficher la vue Analyte Groupe Layout.</p> <hr/> <p><b>Conseil !</b> Un nouveau groupe d'analytes doit d'abord être créé. Pour cela, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats, puis cliquez sur <b>Analyte Group &gt; New</b>.</p> <hr/>
<b>Sample Type</b>	Cliquez pour afficher un type d'échantillon spécifique.

## Trier les données dans les tableaux de résultats

1. Sélectionner jusqu'à trois colonnes dans le tableau de résultats dans l'ordre de tri souhaité.

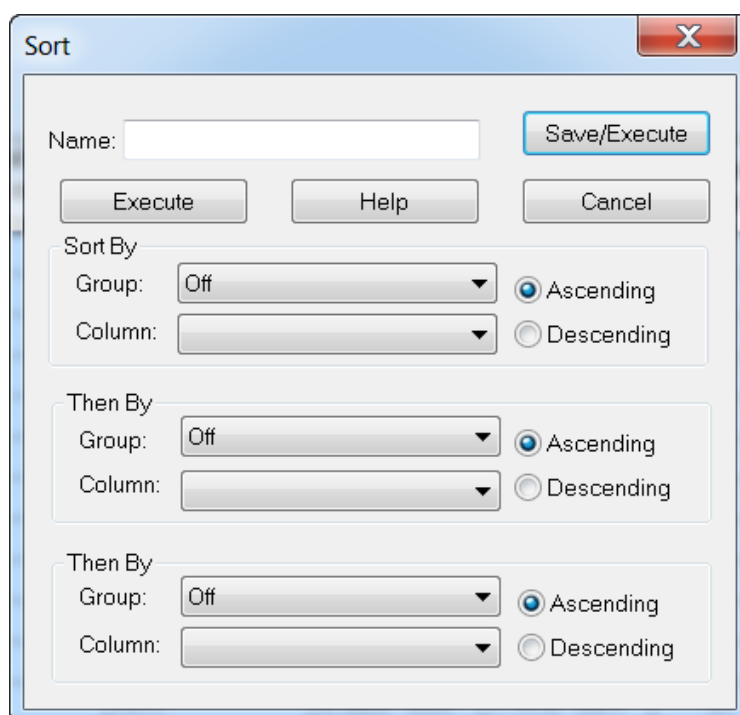
2. Effectuer l'une des opérations suivantes :

- Pour trier par ordre croissant, cliquer sur **A-Z**.
- Pour trier par ordre décroissant, cliquer sur **Z-A**.

## Trier un tableau de résultats et enregistrer les critères de tri

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Sort > New**.

**Illustration 6-13 : Boîte de dialogue Sort**

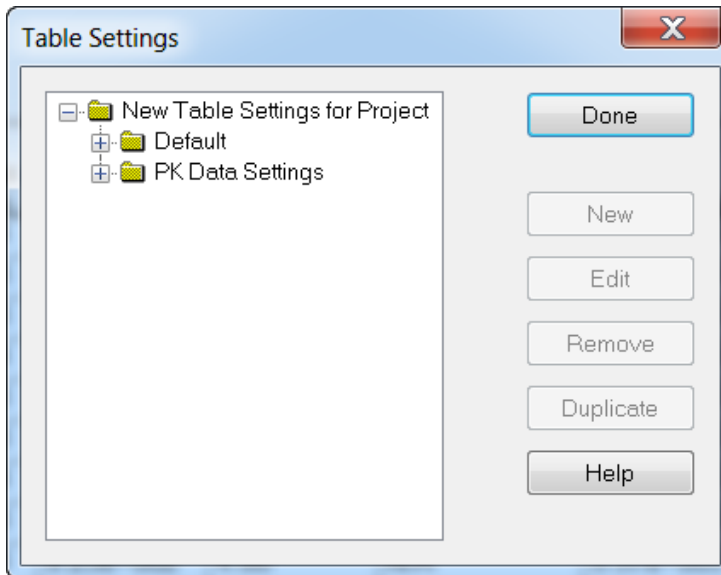


2. Dans le champ **Name**, saisissez le nom du nouveau tri.
3. Pour chaque règle de tri, effectuez les actions suivantes dans les sections **Sort By** et **Then By** :
  - Dans la liste **Group**, sélectionnez le type de colonne de tri.
  - Dans la liste **Column**, sélectionnez la colonne de tri.
  - Sélectionnez l'ordre de tri : **Ascending** ou **Descending**.
4. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Pour effectuer le tri, enregistrer les critères de tri puis fermer la boîte de dialogue **Sort**, cliquer sur **Save/Execute**.
  - Pour effectuer le tri et fermer la boîte de dialogue **Sort** sans enregistrer les critères de tri, cliquer sur **Execute**.

## Enregistrer les critères de tri par défaut pour les prochains tableaux de résultats

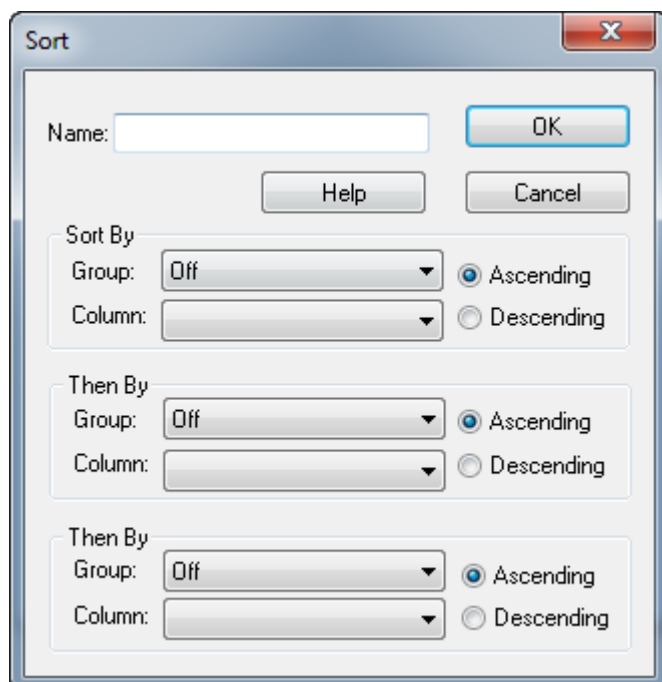
1. Cliquer sur **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Illustration 6-14 : Boîte de dialogue Table Settings



2. Développer le dossier **Table Settings** et double-cliquer sur le dossier **Default**.
3. À partir du dossier **Default** développé, sélectionner le dossier **Sorts**.
4. Cliquer sur **New**.

**Illustration 6-15 : Boîte de dialogue Sort**



5. Dans le champ **Name**, taper un nom.
6. Pour chaque règle de tri à définir, dans la section Sort By, effectuer les opérations suivantes :
  - a. Dans la liste **Group**, sélectionner le type de colonne.
  - b. Dans la liste **Column**, sélectionner la colonne.
  - c. Sélectionner l'ordre de tri : **Ascending** ou **Descending**.
7. Pour enregistrer les critères et fermer la boîte de dialogue Sort, cliquer sur **OK**.
8. Cliquer sur **Terminé**.

## Trier un tableau de résultats à l'aide des critères de tri prédéfinis

Cliquer droit dans le tableau de résultats, cliquer sur **Sort**, puis sélectionner le nom du tri.

## À propos de l'utilisation des requêtes avec les tableaux de résultats

Une requête est une demande d'enregistrements dans un tableau de résultats en fonction de certaines conditions définies à l'aide de critères de sélection textuels ou mathématiques. Appliquez une requête soit pendant le processus de génération d'un tableau de résultats, soit après qu'un tableau a été généré. Ces deux types de requêtes sont appelés requête par défaut et requête spécifique à un tableau. Consultez la section [Requêtes par défaut et requêtes spécifiques à un tableau](#).

Nous recommandons à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.

## Comparer les résultats entre les lots

Le nombre et le nom des analytes doivent être les mêmes pour les données à combiner dans la fenêtre Statistics.

1. Ouvrez un tableau de résultats.
2. Cliquez sur **Tools > Statistics..**
3. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour organiser les résultats par **Results Table**, sélectionnez **Group By Batch** dans la liste **Conc. as Rows**.
  - Pour organiser les résultats par ordre de concentration, sélectionnez **Group By Concentration** dans la liste **Conc. as Rows**.
  - Pour organiser les résultats par ordre de concentration sans ligne affichant les statistiques de chaque groupe ou lot, sélectionnez **Group By Concentration (no All)** dans la liste **Conc. as Rows**.

Le logiciel trie les résultats. À la fin de chaque lot ou groupe, une ou deux lignes supplémentaires apparaissent : **All** (statistiques de tous les tableaux de résultats dans ce groupe) et **Average** (statistiques sur les statistiques de ce lot ou groupe).

## Comment les niveaux de concentration affectent les résultats

La concentration est définie pour tous les CQ et les standards. S'il y a une modification de la précision du niveau de concentration supérieure à la quantité définie dans le champ max. variation de la boîte de dialogue Create Default Query, alors cette information est affichée dans le tableau de résultats.

## Dispositions du tableau de résultats

Le logiciel propose quatre vues prédéfinies du tableau de résultats.

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

Chaque analyte issu d'un échantillon à plusieurs analytes peut être affiché dans la vue Analyte Layout. La vue prédéfinie est la vue Full layout.

### Vue Full Layout

La vue Full layout prédéfinie affiche les données de tous les analytes dans le lot de quantification. Les colonnes affichées dépendent des colonnes sélectionnées dans la boîte de dialogue Results Table Columns et des paramètres sélectionnés à la seconde page de l'assistant de méthode de quantification.

**Illustration 6-16 : Vue Full Layout de l'échantillon**

	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	4.63e+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	4.63e+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

### Vue Summary Layout

La vue Summary Layout contient les colonnes verrouillées et le champ choisi pour chaque analyte dans les colonnes restantes. Par exemple, si Analyte Peak Area est sélectionné dans le menu pour deux analytes, alors les colonnes Sample Name et Analyte Peak Area pour les noms de ces analytes s'affichent. La vue Summary Layout comporte aussi les colonnes Formula et Custom, si elles existent.

Illustration 6-17 : Vue Summary Layout de l'échantillon

	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

## Vue Analyte Layout

La vue Analyte Layout contient les données d'un analyte particulier. Tous les autres analytes sont masqués. Par exemple, si l'analyte A est sélectionné, toutes ses données sont visibles. Les colonnes affichées dépendent de celles sélectionnées dans la boîte de dialogue Results Table Columns et des paramètres sélectionnés dans la seconde page de Quantitation Method Wizard.

Une vue Analyte Layout, avec le pic 1 sélectionné, pourrait ressembler au graphique suivant. Dans cette vue, chaque autre ligne affichée dans la vue Full Layout est exclue.

Illustration 6-18 : Vue Analyte Layout de l'échantillon

	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	6.02e+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"/>

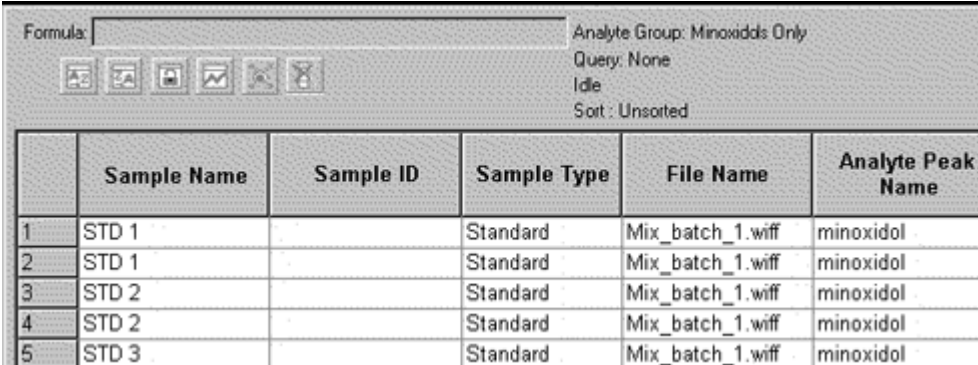
## Vue Analyte Group Layout

La vue Analyte Group Layout contient les données des analytes faisant partie d'un groupe particulier. Les colonnes qui sont sélectionnées comme indiqué dans la boîte de dialogue

## Analyse des données quantitatives

Results Table Columns sont affichées dans le tableau de résultats. Consultez le graphique suivant. Affichez la colonne **Analyte Peak Name** dans le tableau de résultats pour voir les noms des analytes qui font partie du groupe.

Illustration 6-19 : Vue Analyte Group Layout de l'échantillon

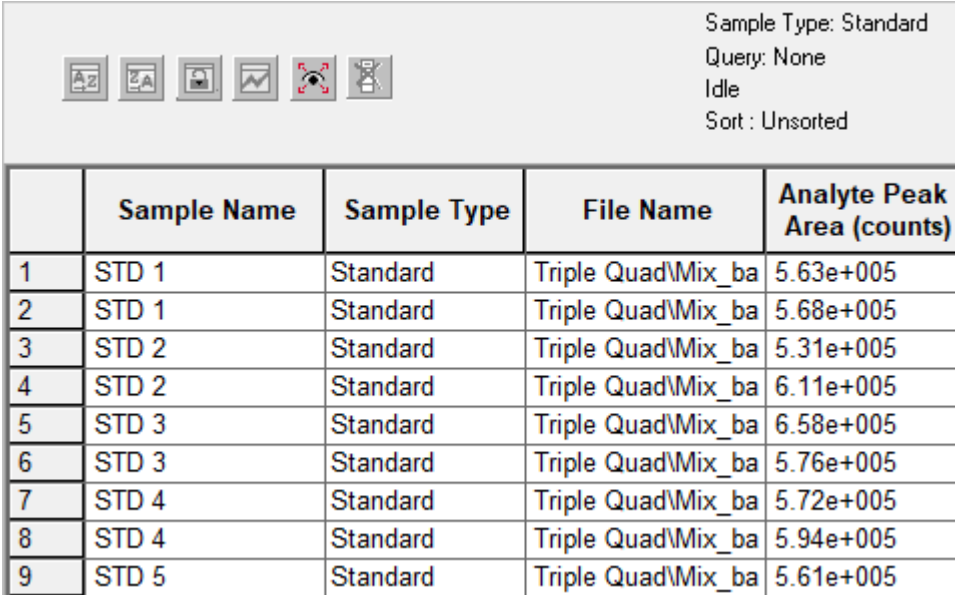


	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

## Vue Sample Type Layout

La vue Sample Type Layout permet à l'utilisateur de filtrer le tableau de résultats par type d'échantillon.

Illustration 6-20 : Vue Sample Type Layout



	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

## Champs du tableau de résultats

Ajouter des colonnes au tableau de résultats standard pour afficher les données du DAD (détecteur à barrettes de diodes) pour les champs Analyte, Internal Standard et Record.



## Champs Formula

Les champs Formula affichent le résultat d'une formule de type feuille de calcul définie par les utilisateurs. Le champ Formula se trouve en haut du tableau de résultats et n'est affiché que si au moins une colonne Formula se trouve dans le tableau de résultats. Le champ Formula devient actif lorsque des cellules de la colonne Formula sont sélectionnées. Le bouton Delete Formula Column au dessous du champ Formula devient aussi disponible quand la colonne Formula est sélectionnée.

Si une colonne de formule est utilisée, il est recommandé à l'utilisateur de valider les résultats.

## Champs Custom

Les champs Custom contiennent des informations définies pendant le processus d'acquisition. Lors de l'acquisition d'échantillons, les utilisateurs peuvent créer des colonnes personnalisées et définir le type de données qui les peuplent. Une fois que la colonne personnalisée fait partie du tableau de résultats, elle peut être traitée comme toute autre colonne (par exemple, l'utilisateur peut la déplacer, la masquer, baser une formule sur elle).

## Champs de la colonne de standards internes

Les colonnes de standards internes dans le tableau de résultats affichent les informations sur le standard interne après l'analyse. Le tableau suivant indique les champs disponibles.

**Tableau 6-13 : Colonnes de standards internes**

Colonnes	Description
<b>IS Peak Name</b>	Nom du pic du standard interne.
<b>IS Units</b>	Unités dans lesquelles le standard interne est exprimé.
<b>IS Peak Area</b>	Aire du pic du standard interne.
<b>IS Peak Height</b>	Hauteur du pic du standard interne.
<b>IS Concentration</b>	Concentration connue du standard interne. Ceci s'applique aux échantillons de type standard et contrôle qualité. Des zéros sont affichés pour les échantillons de type solvant, témoin et double témoin. <b>N/A</b> est affiché pour les inconnus.
<b>IS Retention Time</b>	Temps de rétention chromatographique déterminé par le logiciel.
<b>IS Expected Retention Time</b>	Temps de rétention de l'échantillon représentatif. Pris dans la méthode de quantification.
<b>IS Retention Time Window</b>	Fenêtre du temps de rétention telle qu'elle est spécifiée dans la méthode de quantification.
<b>IS Centroid Location</b>	Temps de rétention moyen pondéré en fonction de l'intensité de l'analyte. Les aires de pic jusqu'à et après cette heure sont identifiées.
<b>IS Start Scan</b>	Numéro du cycle associé à la période ou à la combinaison d'expériences où commence le pic.

## Analyse des données quantitatives

Tableau 6-13 : Colonnes de standards internes (suite)

Colonnes	Description
IS Start Time	Heure associée à la période ou à la combinaison d'expériences où commence le pic.
IS Stop Scan	Numéro du cycle associé à la période ou à la combinaison d'expériences où se termine le pic.
IS Stop Time	Heure associée à la période ou à la combinaison d'expériences où se termine le pic.
IS Integration Type	Méthode par laquelle la ligne de base a été trouvée et intégrée, une fois le pic trouvé. Les types sont manuel et automatique ( <b>Baseline-to-Baseline</b> , <b>Valley</b> , <b>Exponential Skim</b> et <b>Exponential Child</b> ).
IS Signal to Noise	Rapport signal-bruit du pic.
IS Peak Width	Rapport entre la hauteur du pic et sa largeur.
IS UV Range	Plage UV du standard interne.
IS UV Channel	Canal UV du standard interne.
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(Lecture seule) Largeur du pic à 50 % de sa hauteur.
IS Baseline Slope (%/min.)	(Lecture seule) Colonne affichant la pente de la ligne de base.
IS Peak Asymmetry	(Lecture seule) Colonne affichant l'asymétrie du pic calculée selon la formule suivante : $[(\text{Heure de fin du pic}) - (\text{Temps de rétention})] / [(\text{Temps de rétention}) - (\text{Heure de début du pic})]$ Des valeurs proches de 1,0 indiquent des pics symétriques, des valeurs supérieures à 1,0 indiquent des pics traînants et des valeurs inférieures à 1,0 indiquent des pics diffus.
IS Processing Alg	(Lecture seule) Colonne affichant l'algorithme de traitement utilisé.
IS Integration Quality	L'indice Integration Qualité montre la qualité de l'intégration du pic. Des valeurs proches de 1 indiquent des pics bien intégrés, et des valeurs proches de 0 indiquent des pics mal intégrés.

## Champs Record

Les colonnes **Record** du tableau de résultats contiennent des informations supplémentaires sur chaque enregistrement d'échantillon (informations qui ne s'appliquent qu'à l'analyte, pas au standard interne). Le tableau suivant indique les champs disponibles.

Tableau 6-14 : Colonne Record

Colonne	Description
<b>Use Record</b>	Indique si cet enregistrement doit être inclus pour l'étalonnage. S'applique aux standards et aux CQ. Si la case est décochée, les standards et les CQ non utilisés sont supprimés des tableaux statistiques.
<b>Record Modified</b>	Indique si la méthode de quantification utilisée pour l'enregistrement était modifiée par rapport à l'original.
<b>Calculated Concentration</b>	La concentration calculée de l'analyte telle qu'elle l'a été à l'aide de la courbe d'étalonnage.
<b>Relative Retention Time</b>	Le rapport entre les temps de rétention du standard interne et de l'analyte.
<b>Accuracy</b>	La concentration calculée divisée par la concentration connue (en pourcentage).
<b>Response Factor</b>	La surface ou la hauteur du pic (selon l'option de régression) divisée par la concentration de l'analyte.

## Colonnes d'analyte

Les colonnes d'analyte dans le tableau de résultats contiennent des informations sur chaque analyte et standard interne (si un standard interne a été utilisé) après analyse. Le tableau suivant indique les champs disponibles.

Tableau 6-15 : Tableaux de résultats : colonnes d'analyte

Colonne	Description
<b>Analyte Peak Name</b>	Nom de l'analyte.
<b>Analyte Units</b>	Unités dans lesquelles les concentrations de l'analyte sont exprimées.
<b>Analyte Peak Area</b>	Aire de l'analyte.
<b>Analyte Peak Height</b>	Hauteur du pic de l'analyte.
<b>Analyte Concentration</b>	Concentration connue réelle de l'analyte. Ceci s'applique aux échantillons de type standard et contrôle qualité. Des zéros sont affichés pour les échantillons de type solvant, témoin et double témoin. N/A est affiché pour les échantillons inconnus.
<b>Analyte Retention Time</b>	Temps de rétention chromatographique déterminé par le logiciel.
<b>Analyte Expected Retention Time</b>	Temps de rétention de l'échantillon représentatif tel qu'il figure dans la méthode de quantification.

**Tableau 6-15 : Tableaux de résultats : colonnes d'analyte (suite)**

Colonne	Description
<b>Analyte Retention Time Window</b>	Fenêtre du temps de rétention telle qu'elle est spécifiée dans la méthode de quantification.
<b>Analyte Centroid Location</b>	Temps de rétention moyen pondéré en fonction de l'intensité de l'analyte. Les aires de pic jusqu'à et après cette heure sont identifiées.
<b>Analyte Start Scan</b>	Numéro du cycle associé à la période ou à la combinaison d'expériences où commence le pic.
<b>Analyte Start Time</b>	Heure associée à la période ou à la combinaison d'expériences où commence le pic.
<b>Analyte Stop Scan</b>	Numéro du cycle associé à la période ou à la combinaison d'expériences où se termine le pic.
<b>Analyte Stop Time</b>	Heure associée à la période ou à la combinaison d'expériences où se termine le pic.
<b>Analyte Integration Type</b>	Méthode par laquelle la ligne de base a été trouvée et intégrée, une fois le pic trouvé. Les types sont manuel et automatique (Baseline-to-Baseline, Valley, Exponential Skim et Exponential Child).
<b>Analyte Signal to Noise</b>	Rapport signal-bruit du pic par rapport à la ligne de base.
<b>Analyte Peak Width</b>	Rapport entre la hauteur du pic et sa largeur.
<b>Analyte UV Range</b>	Plage UV de l'analyte.
<b>Analyte UV Channel</b>	Canal UV de l'analyte.
<b>Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)</b>	(Lecture seule) Colonne affichant la largeur du pic à 50 % de sa hauteur.
<b>Analyte Baseline Slope (%/min.)</b>	(Lecture seule) Colonne affichant la pente de la ligne de base.

Tableau 6-15 : Tableaux de résultats : colonnes d'analyte (suite)

Colonne	Description
<b>Analyte Peak Asymmetry</b>	<p>(Lecture seule) Colonne affichant l'asymétrie du pic calculée selon la formule suivante :</p> $[(\text{Heure de fin du pic}) - (\text{Temps de rétention})] / [(\text{Temps de rétention}) - (\text{Heure de début du pic})]$ <p>Des valeurs proches de 1,0 indiquent des pics symétriques, des valeurs supérieures à 1,0 indiquent des pics traînants et des valeurs inférieures à 1,0 indiquent des pics diffus.</p>
<b>Analyte Processing Alg</b>	Colonne en lecture seule affichant l'algorithme de traitement utilisé.
<b>Analyte Integration Quality</b>	Cet indice indique la qualité de l'intégration du pic. Des valeurs proches de 1 indiquent des pics bien intégrés, et des valeurs proches de 0 indiquent des pics mal intégrés. Ceci facilite l'examen manuel, car les utilisateurs peuvent voir les pics ayant des valeurs Analyte Integration Quality faibles. De plus, ils peuvent demander les valeurs Analyte Integration Quality inférieures à une valeur qu'ils considèrent comme acceptable pour afficher et examiner manuellement un sous-ensemble des données.

## Colonnes d'échantillon

Les colonnes d'échantillon dans le tableau de résultats affichent des informations sur l'échantillon commun à tous les analytes. Les témoins et les doubles témoins peuvent être définis de façon différente d'un laboratoire à un autre. Les tableaux suivants indiquent les champs disponibles.

Tableau 6-16 : Colonnes d'échantillon

Colonne	Description
<b>Sample Name</b>	Nom que l'utilisateur a attribué à l'échantillon lors de son acquisition.
<b>Sample ID</b>	Identifiant défini par l'utilisateur pour l'échantillon.

Tableau 6-16 : Colonnes d'échantillon (suite)

Colonne	Description
<b>Sample Type</b>	<p>Tous les analytes d'un échantillon doivent avoir le même type d'échantillon. L'un des types d'échantillon est affiché :</p> <p><b>Unknown</b> : contient des analytes dont les concentrations doivent être déterminées.</p> <p><b>Standard</b> : échantillon ayant une concentration d'analyte connue. Utilisé à des fins d'étalonnage.</p> <p><b>Quality Control</b> : échantillon ayant une concentration d'analyte connue. Utilisé pour vérifier la précision de la courbe d'étalonnage.</p> <p><b>Solvent</b> : confirme que le spectromètre de masse est propre. Les solvants ne sont pas traités par le processus de préparation de l'échantillon.</p> <p><b>Blank</b> : échantillon à concentration nulle non utilisé en régression.</p> <p><b>Double Blank</b> : échantillon préparé sans standard interne ni analyte. Confirme que le processus d'extraction n'a rien ajouté.</p>
<b>Sample Comment</b>	Commentaire sur l'échantillon.
<b>Set Number</b>	Numéro identifiant un sous-ensemble ou un lot entier.
<b>Acquisition Method</b>	Nom de la méthode utilisée pour acquérir les échantillons.
<b>Acquisition Date</b>	Date et heure de l'acquisition.
<b>Rack Type</b>	Identifiant associé au type de carrousel utilisé par l'auto-échantillonneur (le cas échéant).
<b>Rack Number</b>	Position occupée par l'échantillon dans le carrousel, lors de l'acquisition. (Dans les auto-échantillonneurs à carrousel unique, c'est toujours la position 1.)
<b>Vial Position</b>	Position du flacon sur la plaque de l'auto-échantillonneur.
<b>Plate Type</b>	Identifiant du type de plaque utilisé (carrousels multi-plaques uniquement).
<b>Plate Number</b>	Position de la plaque sur le carrousel (carrousels multi-plaques uniquement).
<b>File Name</b>	Nom du fichier de données brutes. Ce nom n'est pas unique, car les données de plusieurs échantillons peuvent être stockées dans un même fichier de données.

Tableau 6-16 : Colonnes d'échantillon (suite)

Colonne	Description
<b>Dilution Factor</b>	Quantité à laquelle l'échantillon a été dilué. Utilisé pour déterminer la concentration calculée.
<b>Sample Annotation</b>	Commentaires supplémentaires sur l'échantillon.
<b>Weight-to-Volume Ratio</b>	Rapport poids-volume de l'échantillon.

Tableau 6-17 : Colonnes DAD

Colonne	Description
<b>Analyte Peak Area for DAD</b>	Aire du pic de l'analyte (mAU/min).
<b>Analyte Peak Height for DAD</b>	Hauteur du pic de l'analyte (mAu).
<b>Analyte Wavelength Ranges</b>	Plage des longueurs d'onde (nm).
<b>IS Peak Area for DAD</b>	Aire du pic du standard interne (mAU/min).
<b>IS Wavelength Ranges</b>	Plage des longueurs d'onde (nm).
<b>IS Peak Height for DAD</b>	Hauteur du pic du standard interne (mAu) Concentration calculée pour le DAD.

Le tableau suivant indique les champs qui peuvent être ajoutés au tableau de résultats pour les données acquises par un ADC (convertisseur analogique-numérique).

Tableau 6-18 : Colonnes ADC

Colonne	Description
<b>Analyte Channel</b>	Canal ADC à partir duquel l'analyte a été acquis.
<b>Analyte Wavelength Ranges</b>	Plage des longueurs d'onde (nm).
<b>IS Channel</b>	Canal ADC à partir duquel le standard interne a été acquis.
<b>IS Wavelength Ranges</b>	Plage des longueurs d'onde (nm).











## Conseils relatifs au tableau de résultats

Pour faire ceci...	... faites ce qui suit
Requêtes spécifiques au tableau : pour afficher de nouveau le tableau entier	Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le tableau de résultats, puis cliquez sur <b>Query &gt; Show All</b> . La requête peut être appliquée de nouveau ou modifiée.
Pour examiner les courbes d'étalonnage,	Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où sur la courbe, cliquez sur <b>Active Plot</b> et sélectionnez la courbe à tracer par-dessus.
Examen des statistiques de l'échantillon : examiner un pic individuel	Cochez la case <b>Display the Data Set(s)</b> , puis dans la colonne Data Point, double-cliquez sur le point de données qui représente le pic. Le logiciel affiche la fenêtre Peak Review avec le pic sélectionné par l'utilisateur.
Tableaux de résultats : pour restaurer le tableau de résultats à son ordre initial	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats, puis cliquez sur <b>Sort &gt; Sort By Index</b> .



# Icônes de la barre d'outils

# A

Icône	Nom	Fonction
	Background Subtract	Procède à une soustraction du bruit de fond une fois que les plages de bruit de fond ont été sélectionnées.
	Subtract Range Locked	Verrouille les plages de bruit de fond sélectionnées. Si les plages de bruit de fond sont déverrouillées, les utilisateurs peuvent déplacer chaque plage indépendamment.
	Centroid	Calcule le centroïde des données.
	Home Graph	Restaure le graphique à son échelle d'origine.
	Overlay	Superpose des graphiques.
	Cycle Overlays	Alterne les graphiques superposés.
	Sum Overlays	Additionne les graphiques.
	Show Fragment Interpretation Tool	Ouvre l'outil d'interprétation de la fragmentation qui calcule les fragments du clivage de liaisons simples non cycliques provenant d'un fichier .mol.
	Smooth	Lisse les données en utilisant l'algorithme de lissage.
	Gaussian Smooth	Lisse les données en utilisant le lissage gaussien.

# Tableau des masses exactes du PPG

**B**

Le tableau répertorie les masses monoisotopiques exactes et les espèces chargées (positives et négatives) observées avec les solutions d'étalonnage à base de PPG (polypropylène glycol). Les masses et les ions ont été calculés à l'aide de la formule  $M = H[OC_3H_6]_nOH$  bien que les fragments MS/MS de l'ion positif aient utilisé la formule,  $[OC_3H_6]_n(H^+)$ . Dans tous les calculs,  $H = 1,007825$ ,  $O = 15,99491$ ,  $C = 12,00000$  et  $N = 14,00307$ .

**Remarque :** Lors de la réalisation de l'étalonnage avec les solutions PPG, vérifiez que le pic de l'isotope correct a été utilisé.

**Tableau B-1 : Masses exactes du PPG**

n	Masse exacte (M)	$(M + NH_4)^+$	Fragments 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

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	Fragments MS/MS	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
11	656,471	674,506	639,4	346,270	701,469
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	1 004,723	1 022,757	987,7	520,396	1 049,720
18	1 062,765	1 080,799	1 045,7	549,417	1 107,762
19	1 120,807	1 138,841	1 103,8	578,438	1 165,804
20	1 178,849	1 196,883	1 161,8	607,459	1 223,845
21	1 236,890	1 254,925	1 219,9	636,480	1 281,887
22	1 294,932	1 312,967	1 277,9	665,501	1 339,929
23	1 352,974	1 371,009	1 335,9	694,521	1 397,971
24	1 411,016	1 429,050	1 394,0	723,542	1 456,013
25	1 469,058	1 487,092	1 452,0	752,563	1 514,055
26	1 527,100	1 545,134	1 510,1	781,584	1 572,097
27	1 585,142	1 603,176	1 568,1	810,605	1 630,138

## Tableau des masses exactes du PPG

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	Fragments MS/MS	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
28	1 643,184	1 661,218	1 626,2	839,626	1 688,180
29	1 701,226	1 719,260	1 684,2	868,647	1 746,222
30	1 759,268	1 777,302	1 742,2	897,668	1 804,264
31	1 817,309	1 835,344	1 800,3	926,689	1 862,306
32	1 875,351	1 893,386	1 858,3	955,710	1 920,348
33	1 933,393	1 951,428	1 916,4	984,731	1 978,390
34	1 991,435	2 009,469	1 974,4	1 013,752	2 036,431
35	2 049,477	2 067,511	2 032,5	1 042,773	2 094,473
36	2 107,519	2 125,553	2 090,5	1 071,794	2 152,515
37	2 165,561	2 183,595	2 148,5	1 100,815	2 210,557
38	2 223,603	2 241,637	2 206,6	1 129,836	2 268,599
39	2 281,645	2 299,679	2 264,6	1 158,857	2 326,641
40	2 339,687	2 357,721	2 322,7	1 187,878	2 384,683
41	2 397,728	2 415,783	2 380,7	1 216,899	2 442,724
42	2 455,770	2 473,805	2 438,7	1 245,920	2 500,766
43	2 513,812	2 531,847	2 496,8	1 274,940	2 558,808
44	2 571,854	2 589,888	2 554,8	1 303,961	2 616,850

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	Fragments MS/MS	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
45	2 629,896	2 647,930	2 612,9	1 332,982	2 674,892
46	2 687,938	2 705,972	2 670,9	1 362,003	2 732,934
47	2 745,980	2 764,014	2 729,0	1 391,024	2 790,976
48	2 804,022	2 822,056	2 787,0	1 420,045	2 849,017
49	2 862,064	2 880,098	2 845,0	1 449,066	2 907,059
50	2 920,106	2 938,140	2 903,1	1 478,087	2 965,101
51	2 978,147	2 996,182	2 961,1	1 507,108	3 023,143
52	3 036,189	3 054,224	3 019,2	1 536,129	3 081,185
53	3 094,231	3 112,266	3 077,2	1 565,150	3 139,227
54	3 152,273	3 170,307	3 135,2	1 594,171	3 197,269
55	3 210,315	3 228,349	3 193,3	1 623,192	3 255,311
56	3 268,357	3 286,391	3 251,3	1 652,213	3 313,352
57	3 326,399	3 344,433	3 309,4	1 681,234	3 371,394
58	3 384,441	3 402,475	3 367,4	1 710,255	3 429,436
59	3 442,483	3 460,517	3 425,5	1 739,276	3 487,478
60	3 500,525	3 518,559	3 483,5	1 768,297	3 545,5202
61	3 558,566	3 576,601	3 541,5	1 797,318	3 603,562

## Tableau des masses exactes du PPG

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	Fragments MS/MS	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
62	3 616,608	3 634,643	3 599,6	1 826,339	3 661,604
63	3 674,650	3 692,685	3 657,6	1 855,359	3 719,645
64	3 732,692	3 750,726	3 715,7	1 884,380	3 777,687
65	3 790,734	3 808,768	3 773,7	1 913,401	3 835,729
66	3 848,776	3 866,810	3 831,7	1 942,422	3 893,771
67	3 906,818	3 924,852	3 889,8	1 971,443	3 951,813
68	3 964,860	3 982,894	3 947,8	2 000,464	4 009,855
69	4 022,902	4 040,936	4 005,9	2 029,485	4 067,897
70	4 080,944	4 098,978	4 063,9	2 058,506	4 125,938
71	4 138,985	4 157,020	4 122,0	2 087,527	4 183,980
72	4 197,027	4 215,062	4 180,0	2 116,548	4 242,022
73	4 255,069	4 273,104	4 238,0	2 145,569	4 300,064
74	4 313,111	4 331,145	4 296,1	2 174,590	4 358,106
75	4 371,153	4 389,187	4 354,1	2 203,611	4 416,148
76	4 429,195	4 447,229	4 412,2	2 232,632	4 474,190
77	4 487,237	4 505,271	4 470,2	2 261,653	4 532,231
78	4 545,279	4 563,313	4 528,3	2 290,674	4 590,273

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	Fragments MS/MS	(M + 2NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
79	4 603,321	4 621,355	4 586,3	2 319,695	4 648,315
80	4 661,363	4 679,397	4 644,3	2 348,716	4 706,357
81	4 719,404	4 737,439	4 702,4	2 377,737	4 764,399
82	4 777,446	4 795,481	4 760,4	2 406,758	4 822,441

# Nous contacter

---

## Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- En Europe : [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site [sciex.com/education](http://sciex.com/education) pour obtenir les coordonnées.

## Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## Assistance technique SCIEX

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, consultez le site Web SCIEX à l'adresse [sciex.com](http://sciex.com) ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

- [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support)

## Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Documentation

Cette version du document remplace toutes les versions précédentes de ce document.

Adobe Acrobat Reader est nécessaire pour afficher ce document sous forme électronique. Pour télécharger la dernière version, accéder à <https://get.adobe.com/reader>.

Pour trouver la documentation du logiciel, consulter les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier.

Pour trouver la documentation du matériel, reportez-vous au DVD *Customer Reference* fourni avec le système ou le composant.

---

**Remarque** : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us).

---