
Logiciel Molecule Profiler

Guide de l'utilisateur du logiciel



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

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

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

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

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

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

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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

Table des matières

Chapitre 1 : Mise en route	7
Comment les molécules potentielles et leurs dérivées sont identifiées.....	8
Ouvrir l'espace de travail Molecule Profiler.....	8
Fenêtre Molecule Profiler.....	9
Créer des dossiers.....	12
Chapitre 2 : Custom Elements	13
Acides aminés personnalisés.....	13
Créer un acide aminé personnalisé.....	13
Modifier un acide aminé personnalisé.....	14
Supprimer un acide aminé personnalisé.....	14
Modifications d'acide aminé personnalisé.....	15
Créer une modification d'acide aminé personnalisé.....	15
Modifier une modification d'acide aminé personnalisé.....	16
Supprimer une modification d'acide aminé personnalisé.....	17
Résidus ou groupes terminaux d'oligonucléotide personnalisés.....	17
Créer un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé.....	19
Modifier un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé.....	20
Supprimer un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé.....	20
Importer les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide.....	20
Exporter les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide.....	21
Chapitre 3 : Bibliothèque de composés	22
Comment les structures et les séquences sont utilisées.....	22
Ajouter une structure.....	22
Ajouter une séquence peptidique.....	23
Conventions de dénomination des séquences peptidiques.....	24
Ajouter une séquence d'oligonucléotide.....	25
Conventions de dénomination des séquences d'oligonucléotide.....	26
Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff.....	27
Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt.....	31
Ajouter des informations à la bibliothèque de composés à partir d'un tableau de résultats.....	31
Chapitre 4 : Ensembles de biotransformations	33
À propos des biotransformations.....	33
Créer un ensemble de biotransformations.....	33
Modifier un ensemble de biotransformations.....	34
Supprimer un ensemble de biotransformations.....	35

Table des matières

Chapitre 5 : Créer des méthodes de traitement	36
Paramètres de traitement.....	36
Sélectionner le type de méthode.....	36
Sélectionner les valeurs des paramètres.....	37
Sélectionner un composé dans une bibliothèque.....	37
À propos des stratégies de recherche de pics.....	38
Paramètres de traitement génériques.....	42
Paramètres de traitement propres à un composé.....	54
Modifier l'enrichissement isotopique des formules de peptide et d'oligonucléotide.....	59
Chapitre 6 : Rechercher les métabolites potentiels	60
À propos de l'espace de travail Batch.....	60
Spécifier des options de lot.....	62
Options de traitement par lot.....	63
Créer un lot.....	64
Copier et coller une ligne d'un lot.....	65
Effacer une ligne de lot.....	66
Ouvrir un lot.....	66
Importer un lot.....	66
Enregistrer un lot.....	68
Envoyer un lot.....	69
Chapitre 7 : Afficher les résultats	70
À propos de l'espace de travail Results.....	70
Afficher uniquement le spectre filtré.....	76
À propos des filtres de résultats.....	77
Modifier les résultats.....	79
Supprimer des lignes.....	79
Modifier le nom et la formule d'un métabolite potentiel.....	79
Grouper par pics.....	80
Attribuer des ID de pic.....	81
Spectres MS/MS.....	81
Chapitre 8 : Caractériser les données MS/MS	85
À propos de l'affichage Interpretation	85
Affichage Interpretation de Petite molécule.....	85
Affichage Interpretation des peptides.....	88
Affichage Interpretation des oligonucléotides.....	91
Affichage Interpretation d'ADC.....	93
Interprétation manuelle.....	96
Workflow Petite molécule.....	96
Workflows Peptide.....	108
Workflows Oligonucléotide.....	113
Workflow ADC.....	118
Interprétation automatique.....	128
Workflow Petite molécule.....	128

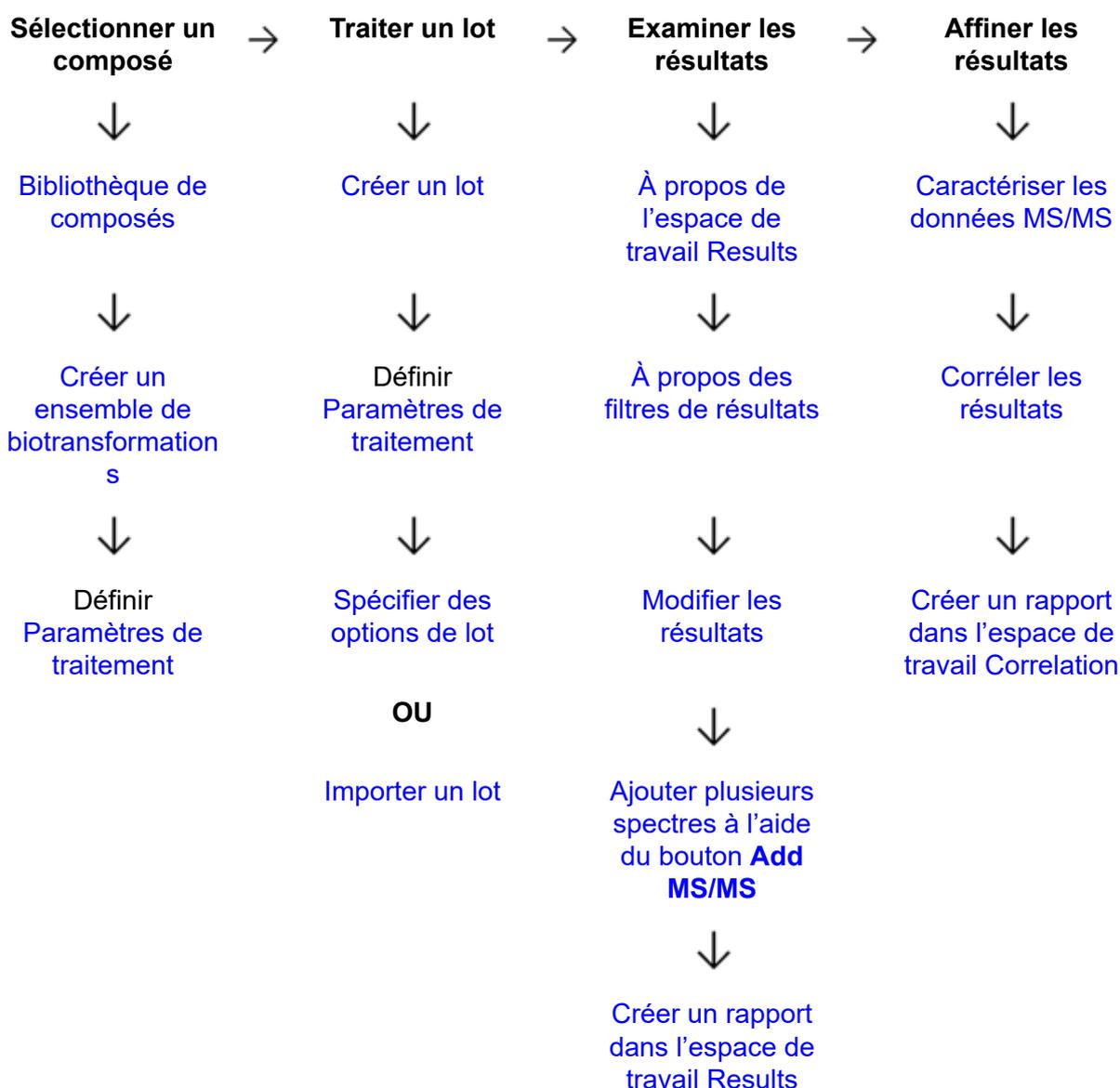
Workflows Peptide	128
Chapitre 9 : Corréler les résultats	131
Préparer la corrélation	131
Personnaliser la corrélation	132
Améliorer l'alignement des pics	132
Définir la fusion des pics	132
À propos de l'espace de travail Correlation	133
Modifier le nom d'un métabolite corrélé	135
Comparer des métabolites corrélés	136
À propos des filtres de corrélation	136
Chapitre 10 : Rapports	138
Créer un rapport dans l'espace de travail Results	139
Créer un rapport dans l'espace de travail Correlation	140
Copier et coller un graphique	141
Copier et coller le tableau Potential Metabolites	141
Chapitre 11 : Intégration analogique	142
Intégrer manuellement les données analogiques	142
Afficher les contrôles	144
Effectuer une soustraction de la référence	144
Modifier le décalage du T.R.	144
Définir les options d'intégration analogique	144
Mettre à jour le tableau	145
Mettre à jour les résultats et fermer	145
Chapitre 12 : Résolution des problèmes	147
Impossible d'ouvrir un fichier de structure	147
Modifier les autorisations utilisateur	147
Aucun métabolite potentiel trouvé	147
Trop de métabolites potentiels trouvés	148
Temps de traitement longs	148
Afficher le dossier ProgramData	148
Problèmes connus et limites	149
Annexe A : Exemple d'oligonucléotide personnalisé	150
Créer l'autre extrémité	150
Créer les résidus internes comme d'autres résidus	152
Écrire une séquence personnalisée	153
Annexe B : Glossaire	154
Comment le système nomme les métabolites	154
IDA	154
ID de pic	154
Facteur de réponse relatif	154

Table des matières

Spectre de référence	154
Nous contacter	155
Formation destinée aux clients	155
Centre d'apprentissage en ligne	155
Assistance technique SCIEX	155
Cybersécurité	155
Documentation	155

Utilisez le logiciel Molecule Profiler pour rechercher des molécules et leurs dérivés, y compris les impuretés et métabolites potentiels, dans les données acquises à l'aide du logiciel Analyst TF et de SCIEX OS.

Le logiciel Molecule Profiler prend en charge l'identification des petites molécules, des peptides, des conjugués anticorps-médicaments et des oligonucléotides au-dessous de 10 kDa.



Comment les molécules potentielles et leurs dérivées sont identifiées

Le logiciel intègre plusieurs stratégies de recherche de pics (ou algorithmes) qui lui permettent de trouver des molécules potentielles dans un échantillon. Consultez la section [À propos des stratégies de recherche de pics](#).

Si un pic trouvé est une molécule prédite, le logiciel attribue un nom spécifique dérivé du précurseur ou d'une combinaison d'une ou de plusieurs transformations. Selon le workflow, les transformations pourraient inclure un ensemble de biotransformations sélectionné, des métabolites de clivage ou des clivages hydrolytiques potentiels, ou des fragments de séquence potentiels d'un anticorps.

Pour une analyse de données Petite molécule, les transformations incluent un ensemble de biotransformations sélectionné et des métabolites de clivage potentiels.

Pour une analyse de données Peptide, les transformations incluent un ensemble de biotransformations sélectionné et des clivages hydrolytiques potentiels.

Pour une analyse de données ADC (Antibody Drug Conjugate), les transformations incluent un ensemble de biotransformations sélectionné, des métabolites de clivage potentiels et des fragments de séquence potentiels d'une protéine d'anticorps digérée.

Pour une analyse de données Oligonucléotide, les transformations incluent une sélection d'ensembles de biotransformations appropriés à la fois aux métabolites et aux impuretés, ainsi que des métabolites de clivage potentiels, des séquences n-1 internes et des séquences n+1 d'extrémité.

Si la stratégie de recherche de pics générique est utilisée et si le pic est une molécule inattendue, il se voit attribuer comme nom générique « Loss of » ou « Gain of », et l'adduit protoné correspondant à la charge de l'ion moléculaire.

Si des fichiers de contrôle sont sélectionnés avec l'échantillon, le logiciel effectue une comparaison entre l'échantillon et les données de contrôle. Si des fichiers analogiques sont sélectionnés avec l'échantillon, le logiciel effectue une comparaison entre les données du spectromètre de masse et les données analogiques.

Les utilisateurs peuvent modifier les paramètres qui contrôlent chaque algorithme. Consultez la section [Sélectionner les valeurs des paramètres](#).

Ouvrir l'espace de travail Molecule Profiler

SCIEX OS 2.1.5 ou version ultérieure doit être installé et une licence Molecule Profiler valide doit être activée.

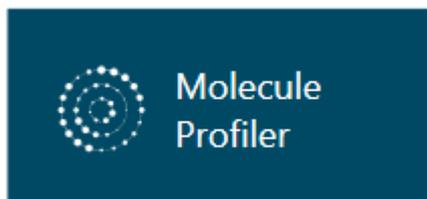
1. Sélectionnez le logiciel dans le menu Start : **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**.

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

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

2. Si la boîte de dialogue Logon apparaît, saisissez le nom d'utilisateur et le mot de passe d'un utilisateur autorisé à utiliser le logiciel, puis cliquez sur **OK**.
La page d'accueil s'ouvre.
3. Cliquez sur la vignette Molecule Profiler.

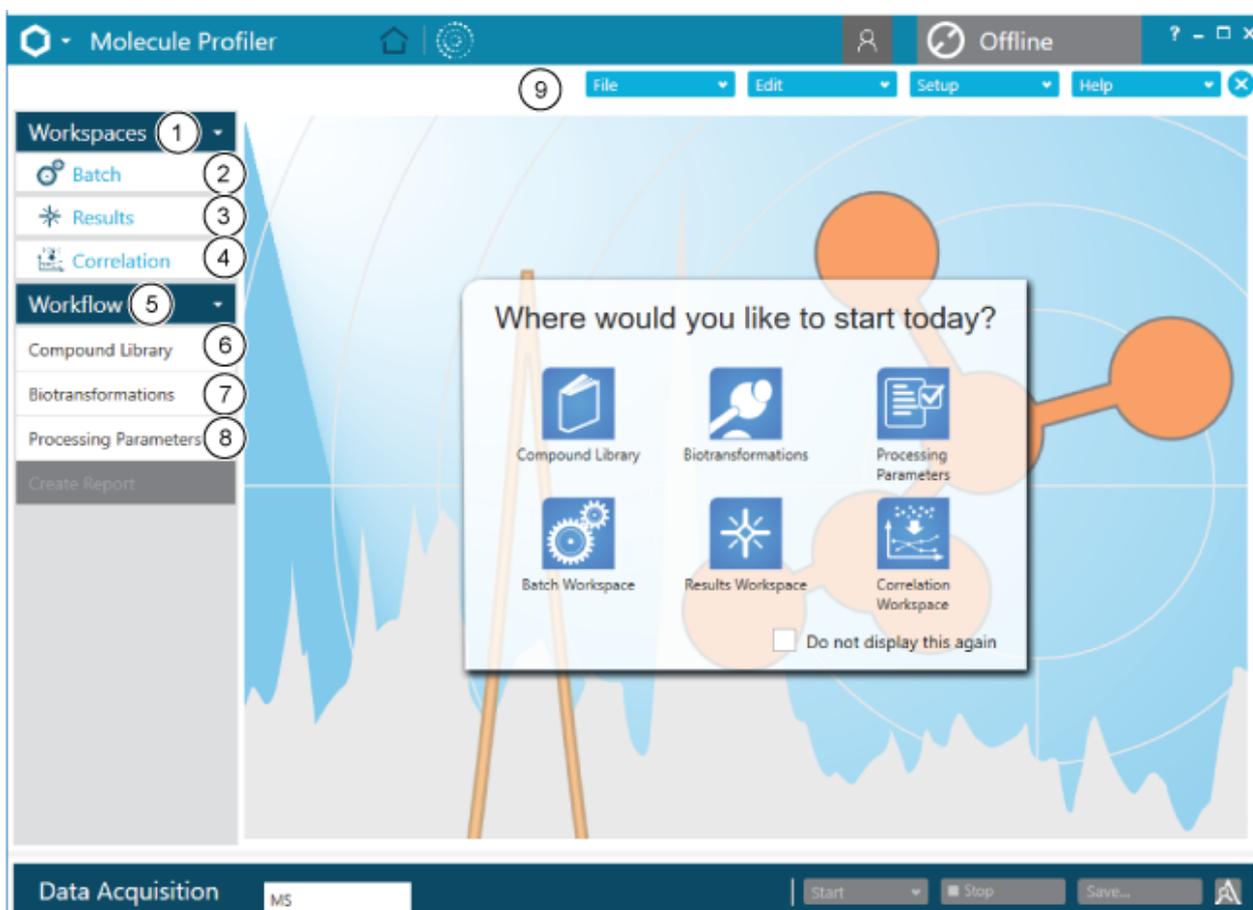
Illustration 1-1 : Vignette Molecule Profiler



L'espace de travail Molecular Profiler apparaît.

Fenêtre Molecule Profiler

Illustration 1-2 : Fenêtre Molecule Profiler



Mise en route

Élément	Description
1	Liste des espaces de travail
2	Espace de travail Batch. Utilisez cet espace de travail pour rechercher les métabolites potentiels. Consultez la section À propos de l'espace de travail Batch .
3	Espace de travail Results. Utilisez cet espace de travail pour afficher les métabolites potentiels après le traitement. Consultez la section À propos de l'espace de travail Results .
4	Espace de travail Correlation. Utilisez cet espace de travail pour comparer les métabolites trouvés dans différents fichiers de résultats. Consultez la section À propos de l'espace de travail Correlation .
5	Liste des workflows
6	Bibliothèque de composés. Permet de créer et de gérer une bibliothèque de composés. Consultez la section Bibliothèque de composés .
7	Biotransformations. Permet de créer et de gérer des listes de transformations communes. Consultez la section Ensembles de biotransformations .
8	Paramètres de traitement. Permet de créer et de gérer les méthodes de traitement pouvant être utilisées dans l'espace de travail Batch. Consultez la section Créer des méthodes de traitement .
9	Barre de menus. Consultez le Tableau 1-1 .

Tableau 1-1 : Commandes de menu

Élément	Description
Menu File	
New	<ul style="list-style-type: none">• Batch : crée un lot. Consultez la section Créer un lot.• Correlation : crée une corrélation. Consultez la section Préparer la corrélation.
Open	<ul style="list-style-type: none">• Batch : ouvre un lot.• Correlation : ouvre un fichier de corrélation.• Results : ouvre un fichier de résultats.
Save Batch	Enregistre le lot dans l'espace de travail Batch.
Save Batch As	Enregistre le lot sous un autre nom dans l'espace de travail Batch.
Create Report	Crée un rapport. Consultez la section Rapports .
Recent reports	Ouvre un rapport récent.
Menu Edit	

Tableau 1-1 : Commandes de menu (suite)

Élément	Description
Edit Name	Modifie le nom et la formule d'un composé.
Copy Selected Table	Copie le tableau sélectionné.
Copy Selected Graph	Copie le graphique sélectionné.
Copy Batch Row	Copie la ligne sélectionnée du lot.
Paste Batch Row	Colle la ligne de lot copiée, à l'emplacement sélectionné.
Clear Batch Row	Supprime le contenu de la ligne sélectionnée du lot.
Delete Selected Row	Supprime la ligne du lot sélectionnée, du tableau de résultats. Le logiciel recalcule les résultats.
Undo Delete	Rétablit la dernière ligne supprimée. Le logiciel recalcule les résultats.
Hide Unchecked Rows	Masque les lignes non sélectionnées.
Show Hidden Rows	Affiche les lignes non sélectionnées.
Custom Elements	Ouvre la boîte de dialogue Custom Elements. Utilisez cette boîte de dialogue pour définir les acides aminés et les résidus d'oligonucléotide. Consultez la section Custom Elements .
Menu Setup	
Compound Library	Ouvre la bibliothèque de composés . Consultez la section Bibliothèque de composés .
Biotransformations	Ouvre la liste des ensembles de biotransformations. Consultez la section Ensembles de biotransformations .
Processing Parameters	Ouvre la fenêtre des méthodes de traitement. Consultez la section Créer des méthodes de traitement .
Filters	<ul style="list-style-type: none"> • Results : définit les filtres de l'espace de travail Results. Consultez la section À propos des filtres de résultats. • Correlation : définit les filtres de l'espace de travail Correlation. Consultez la section À propos des filtres de corrélation. • Interpretation : définit les filtres de l'espace de travail Interpretation.

Tableau 1-1 : Commandes de menu (suite)

Élément	Description
Create New Folder	Crée un dossier. Consultez la section Créer des dossiers .

Créer des dossiers

Les dossiers stockent les fichiers dont le logiciel a besoin pour trouver les molécules potentielles dans un échantillon, ainsi que les fichiers de résultats.

Il est également possible de créer des dossiers personnalisés pour organiser les résultats.

1. Cliquez sur **Setup > Create New Folder**.
La boîte de dialogue Create New Folder apparaît.
2. Saisissez le nom du dossier dans le champ **Name**.
Le champ **Location** affiche l'emplacement du répertoire de données (C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Data). Tous les dossiers créés sont stockés dans ce répertoire.
3. Cliquez sur **OK**.
Lorsqu'un dossier est créé, les deux sous-dossiers suivants sont créés automatiquement : Processing Parameters et Results.

La boîte de dialogue Custom Elements contient les onglets suivants :

- L'onglet AA List contient des informations pour une liste d'acides aminés standard. Ces informations ne peuvent être ni modifiées ni supprimées. Les utilisateurs peuvent ajouter des acides aminés personnalisés à cette liste, puis modifier ou supprimer les éléments ajoutés, le cas échéant. Les acides aminés ajoutés sont automatiquement ajoutés en bas de la liste. Cependant, il est possible de la trier en cliquant sur l'un des en-têtes de colonne.
- L'onglet AA Modifications contient les décalages de masse des différentes modifications applicables aux groupes terminaux de peptide et aux groupes latéraux de résidus d'acide aminé. Ces informations ne peuvent être ni modifiées ni supprimées. Les utilisateurs peuvent ajouter des modifications d'acide aminé personnalisé à cette liste, puis modifier ou supprimer les éléments ajoutés, le cas échéant. Les modifications d'acide aminé ajoutées apparaissent automatiquement en bas de la liste. Cependant, il est possible de la trier en cliquant sur l'un des en-têtes de colonne.
- L'onglet Oligo List contient les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide prédéfinis. Ces informations ne peuvent être ni modifiées ni supprimées. Les utilisateurs peuvent ajouter de nouveaux résidus et groupes terminaux d'oligonucléotide à cette liste, puis modifier ou supprimer les éléments ajoutés, le cas échéant. Les résidus ajoutés apparaissent automatiquement en bas de la liste. Cependant, il est possible de la trier en cliquant sur l'un des en-têtes de colonne.

Acides aminés personnalisés

Créer un acide aminé personnalisé

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet AA List est sélectionné.
3. Cliquez sur **New**.
La boîte de dialogue New Custom Amino Acid Residue apparaît.
4. Renseignez les champs décrits dans le tableau suivant, puis cliquez sur **OK**.

Tableau 2-1 : Champs de la boîte de dialogue New Custom Amino Acid Residue

Champ	Description	Valeur acceptable
Name	Nom de l'acide aminé	Alphanumérique
Symbol	Symbole de l'acide aminé	<ul style="list-style-type: none">• Alphanumérique• Première lettre majuscule

Tableau 2-1 : Champs de la boîte de dialogue New Custom Amino Acid Residue (suite)

Champ	Description	Valeur acceptable
Residue Formula	Formule de l'acide aminé	Formule empirique utilisant des éléments périodiques. Un isotope enrichi peut également être inclus dans la formule. Par exemple, C13, pour l'isotope carbone 13.

L'acide aminé personnalisé est ajouté en bas du tableau des acides aminés, avec son nom, son symbole et sa masse.

Modifier un acide aminé personnalisé

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet AA List est sélectionné.
3. Sélectionnez l'acide aminé à modifier.

Remarque : Seuls les acides aminés personnalisés ajoutés par l'utilisateur sont modifiables. Les acides aminés distribués avec le logiciel ne sont pas modifiables.

4. Cliquez sur **Edit**.
La boîte de dialogue Edit Custom Amino Acid Residue apparaît.
5. Modifiez les champs décrits dans le tableau suivant.

Tableau 2-2 : Champs de la boîte de dialogue Edit Custom Amino Acid Residue

Champ	Description	Valeur acceptable
Name	Nom de l'acide aminé	Alphanumérique
Symbol	Symbole de l'acide aminé	<ul style="list-style-type: none">• Alphanumérique• Première lettre majuscule
Residue Formula	Formule de l'acide aminé	Formule empirique utilisant des éléments périodiques

6. Cliquez sur **OK**.
Le nom, le symbole et la masse de l'acide aminé personnalisé sélectionné sont mis à jour, le cas échéant, dans le tableau.

Supprimer un acide aminé personnalisé

Remarque : La suppression d'un d'acide aminé personnalisé utilisé dans une méthode de traitement ou un résultat peut provoquer un comportement inattendu.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.

La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.

2. Vérifiez que l'onglet AA List est sélectionné.
3. Sélectionnez l'acide aminé à supprimer.

Remarque : Seuls les acides aminés personnalisés ajoutés par l'utilisateur peuvent être supprimés. Les acides aminés distribués avec le logiciel ne peuvent pas être supprimés.

4. Cliquez sur **Delete**.
L'acide aminé personnalisé est supprimé du tableau.

Modifications d'acide aminé personnalisé

Créer une modification d'acide aminé personnalisé

Remarque : Les modifications d'acide aminé personnalisé ne s'appliquent qu'aux acides aminés standard.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet AA Modifications est sélectionné.
3. Cliquez sur **New**.
La boîte de dialogue New Custom Modification apparaît.
4. Renseignez les champs décrits dans le tableau suivant, puis cliquez sur **OK**.

Tableau 2-3 : Champ de la boîte de dialogue New Custom Modification

Champ	Description	Valeur acceptable
Name	Nom du résidu	Alphanumérique
Symbol	Symbole du résidu	<ul style="list-style-type: none"> • Doit commencer par _ • Alphanumérique • Première lettre majuscule
Formula Gain	Formule gagnée par le résidu	Formule empirique utilisant des éléments périodiques
Formula Lost	Formule perdue par le résidu	Formule empirique utilisant des éléments périodiques
Mod Type	Position de la modification	Acide aminé, Extrémité N, Extrémité C, Extrémité N de protéine et Extrémité C de protéine

Tableau 2-3 : Champ de la boîte de dialogue New Custom Modification (suite)

Champ	Description	Valeur acceptable
Applies to AA	Nom de l'acide aminé associé	Code à une lettre représentant l'acide aminé standard auquel la modification personnalisée va être appliquée. Par exemple, P pour proline. Laissez ce champ vide pour appliquer la modification personnalisée à tous les acides aminés standard.

La modification d'acide aminé personnalisé est ajoutée en bas du tableau des modifications d'acide aminé, avec son symbole, son décalage de masse et son nom.

Modifier une modification d'acide aminé personnalisé

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet AA Modifications est sélectionné.
3. Sélectionnez la modification à modifier.

Remarque : Seules les modifications personnalisées ajoutées par l'utilisateur peuvent être modifiées. Les modifications distribuées avec le logiciel ne peuvent pas être modifiées.

4. Cliquez sur **Edit**.
La boîte de dialogue Edit Custom Modification apparaît.
5. Modifiez les champs appropriés décrits dans le tableau suivant.

Tableau 2-4 : Champs de la boîte de dialogue Edit Custom Modification

Champ	Description	Valeur acceptable
Name	Nom du résidu	Alphanumérique
Symbol	Symbole du résidu	<ul style="list-style-type: none"> • Doit commencer par _ • Alphanumérique • Première lettre majuscule
Formula Gain	Formule gagnée par le résidu	Formule empirique utilisant des éléments périodiques
Formula Lost	Formule perdue par le résidu	Formule empirique utilisant des éléments périodiques
Mod Type	Position de la modification	Acide aminé, Extrémité N, Extrémité C, Extrémité N de protéine et Extrémité C de protéine

Tableau 2-4 : Champs de la boîte de dialogue Edit Custom Modification (suite)

Champ	Description	Valeur acceptable
Applies to AA	Nom de l'acide aminé associé	Code à une lettre représentant l'acide aminé standard auquel la modification personnalisée va être appliquée. Par exemple, P pour proline. Laissez ce champ vide pour appliquer la modification personnalisée à tous les acides aminés standard.

6. Cliquez sur **OK**.
Le nom, le symbole et le décalage de masse de la modification personnalisée sélectionnée sont mis à jour, le cas échéant, dans le tableau.

Supprimer une modification d'acide aminé personnalisé

Remarque : La suppression d'une modification d'acide aminé personnalisé utilisée dans une méthode de traitement ou un résultat peut provoquer un comportement inattendu.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet AA Modifications est sélectionné.
3. Sélectionnez la modification à supprimer.

Remarque : Seules les modifications personnalisées ajoutées par l'utilisateur peuvent être supprimées. Les modifications distribuées avec le logiciel ne peuvent pas être supprimées.

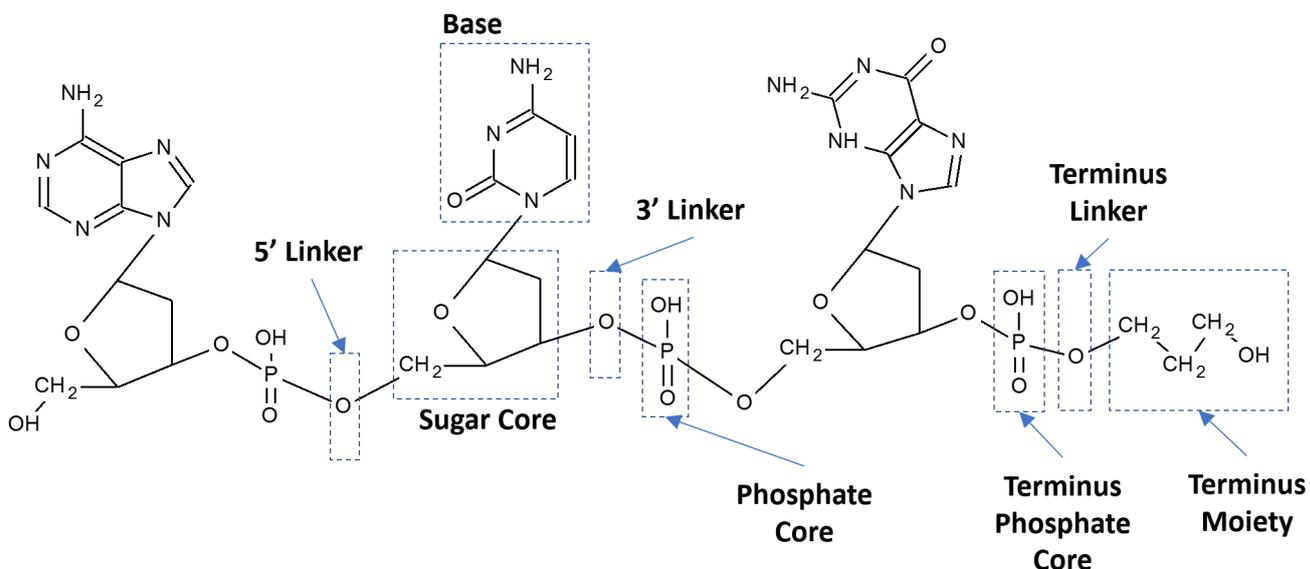
4. Cliquez sur **Delete**.
La modification personnalisée est supprimée du tableau des modifications.

Résidus ou groupes terminaux d'oligonucléotide personnalisés

Utilisez des éléments pour créer des séquences contenant des groupes fonctionnels personnalisés qu'il est possible d'ajouter à la structure principale d'un oligonucléotide. Ces modifications peuvent être incluses dans une séquence, puis recherchées et identifiées par le logiciel Molecule Profiler.

Un oligonucléotide peut être décomposé en plusieurs sous-structures.

Illustration 2-1 : Sous-structures d'oligonucléotide



Les utilisateurs peuvent modifier les sous-structures principales d'un oligonucléotide ou définir un nouveau cœur, une nouvelle extrémité et une nouvelle chaîne principale de phosphate. Lors de la création d'une séquence modifiée personnalisée, utilisez cette structure généralisée :

5'-(Terminus Moiety)-(Terminus Linker)-(Terminus Phosphate Core)-(Residue Type)₁-...-(Residue Type)_n-(Terminus Phosphate Core)-(Terminus Linker)-(Terminus Moiety)-3'

Dans la boîte de dialogue New Oligo Residue or Terminus, le champ **Type** contient plusieurs types prédéfinis de résidus ou d'extrémités. Ces types prédéfinis limitent la modification à certaines sous-structures de l'oligonucléotide, pour simplifier la création des modifications propres au type lui-même. Pour comprendre comment chaque type s'intègre dans la structure générale décrite ci-dessus, consultez le tableau suivant.

Tableau 2-5 : Types

Type	Catégorie	Sous-structure modifiable
ADN	Type de résidu	Base
ADN*	Type de résidu	Base
ARN	Type de résidu	Base
ARN*	Type de résidu	Base
ARN 2'-O-méthyle	Type de résidu	Base
ARN 2'-O-méthyle*	Type de résidu	Base
Bloqué (ANL)	Type de résidu	Base
Bloqué (ANL)*	Type de résidu	Base

Tableau 2-5 : Types (suite)

Type	Catégorie	Sous-structure modifiable
Autre résidu	Type de résidu	Base Lieur 5' Cœur de sucre Lieur 3' Cœur de phosphate
Extrémité phosphatée*	Fraction d'extrémité	Fraction d'extrémité
Extrémité phosphatée	Fraction d'extrémité	Fraction d'extrémité
Autre extrémité	Fraction d'extrémité Lieur d'extrémité Cœur de phosphate d'extrémité	Fraction d'extrémité Lieur d'extrémité Cœur de phosphate

* Chaîne principale phosphorothioatée

Le type le plus flexible pour ajouter et modifier des formules chimiques est « Autre résidu ». Il peut être modifié pour prendre en charge plusieurs sous-structures personnalisées différentes, permettant à l'utilisateur de définir des oligonucléotides très personnalisés. De même, le type « Autre extrémité » permet à l'utilisateur de définir une extrémité 5' ou 3', un lieu et un cœur.

Pour un exemple, consultez la section [Exemple d'oligonucléotide personnalisé](#).

Créer un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé

Conseil ! Pour créer un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide en copiant un, sélectionnez l'élément existant dans l'onglet Oligo List, puis cliquez sur **New From**.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet Oligo List est sélectionné.
La liste contient tous les résidus et groupes terminaux d'oligonucléotide prédéfinis.
3. Cliquez sur **New**.
La boîte de dialogue New Oligo Residue or Terminus apparaît.
4. Renseignez les champs dans la boîte de dialogue. Pour obtenir des exemples, consultez la section [Exemple d'oligonucléotide personnalisé](#).

Custom Elements

5. Cliquez sur **OK**.
Le résidu ou le groupe terminal personnalisé est ajouté en bas du tableau.

Modifier un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet Oligo List est sélectionné.
3. Sélectionnez le résidu ou le groupe terminal à modifier.

Remarque : Seuls les résidus et groupes terminaux ajoutés par l'utilisateur sont modifiables. Les résidus et groupes terminaux distribués avec le logiciel ne sont pas modifiables.

4. Cliquez sur **Edit**.
La boîte de dialogue Edit Custom Amino Acid Residue apparaît.
5. Modifiez les propriétés du résidu ou du groupe terminal.
6. Cliquez sur **OK**.

Supprimer un résidu ou un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé

Remarque : La suppression d'un résidu ou d'un groupe terminal d'oligonucléotide personnalisé utilisé dans une méthode de traitement ou un résultat peut provoquer un comportement inattendu.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet Oligo List est sélectionné.
3. Sélectionnez le résidu ou le groupe terminal à supprimer.

Remarque : Seuls les résidus et groupes terminaux ajoutés par l'utilisateur peuvent être supprimés. Les résidus et groupes terminaux distribués avec le logiciel ne peuvent pas être supprimés.

4. Cliquez sur **Delete**.
Le résidu ou le groupe terminal personnalisé est supprimé du tableau.

Importer les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide

Il est possible d'importer des résidus et des groupes terminaux d'oligonucléotide à partir d'un fichier texte.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.

La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.

2. Vérifiez que l'onglet Oligo List est sélectionné.
La liste contient tous les résidus et groupes terminaux d'oligonucléotide prédéfinis.
3. Cliquez sur **Import**.
La boîte de dialogue Import Text File apparaît.
4. Naviguez jusqu'au fichier texte, sélectionnez-le, puis cliquez sur **Open**.

Exporter les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide

Il est possible d'exporter les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide vers un fichier texte.

1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
La boîte de dialogue Custom Elements apparaît.
2. Vérifiez que l'onglet Oligo List est sélectionné.
La liste contient tous les résidus et groupes terminaux d'oligonucléotide prédéfinis.
3. Sélectionnez les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide à exporter.

Conseil ! Appuyez sur **Ctrl+A** pour sélectionner tous les résidus et groupes terminaux dans la liste.

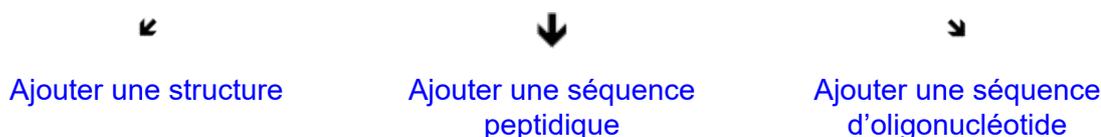
4. Cliquez sur **Export**.
La boîte de dialogue Save As s'ouvre.
5. Saisissez le nom du fichier texte dans lequel enregistrer les résidus et les groupes terminaux d'oligonucléotide.

La bibliothèque de composés stocke des informations, notamment la formule chimique, la structure ou la séquence, le modèle isotopique et les spectres MS/MS des composés. Les utilisateurs peuvent aussi spécifier le spectre de référence de chaque composé. Chaque entrée de la bibliothèque peut être utilisée pour créer des paramètres de traitement.

Le logiciel est installé avec une bibliothèque de base de composés, mais les utilisateurs peuvent personnaliser cette bibliothèque en ajoutant, en modifiant ou en supprimant des entrées.

Remarque : Chaque entrée requiert une formule chimique et au moins un spectre MS/MS.

Options de la bibliothèque de composés



Comment les structures et les séquences sont utilisées

Le logiciel utilise les structures chimiques, les séquences de peptides et les séquences d'oligonucléotide pour générer des valeurs de paramètres propres à un composé, comme des métabolites de clivage potentiels.

Remarque : Le logiciel génère une formule automatiquement à partir de la structure ou de la séquence.

Le logiciel accepte les fichiers mol versions 2000 et 3000, y compris ceux contenant des structures Markush ou multiples.

Ajouter une structure

Utilisez des fichiers wiff et txt pour ajouter un spectre de référence à des entrées de la bibliothèque de composés.

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Compound Library**.
La boîte de dialogue Compound Library apparaît.
2. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Créez un composé.
 - a. Cliquez sur **New**, puis sélectionnez **Structure** dans la liste.
La boîte de dialogue New Entry apparaît.

- b. Saisissez le nom du composé dans le champ **Name**, puis cliquez sur **OK**.

Le logiciel renseigne automatiquement le nom fourni dans le champ **Compound name** dans la boîte de dialogue Compound Library.

- Sélectionnez un composé dans la liste déroulante du champ **Compound name**.

La boîte de dialogue Compound Library est mise à jour avec les informations correspondant au composé sélectionné.

3. Cliquez sur **Open Structure**.

La boîte de dialogue Open Structure File apparaît.

4. Accédez à un fichier mol valide, puis sélectionnez-le.

5. Cliquez sur **Open**.

Le logiciel renseigne les champs suivants dans la boîte de dialogue Compound Library :

- Structure
- Chemical formula
- Polarity
- Isotope Pattern

Par défaut, le champ **Adduct** affiche un adduit protoné à simple charge $[M+H]^+$ ou $[M-H]^-$. Le logiciel met également à jour les informations appropriées dans le champ **m/z**.

6. Sélectionnez la polarité de l'acquisition dans le champ **Polarity**.
Le champ **Isotope Pattern** ainsi que les valeurs **m/z** et **Adduct** dans l'onglet Compound Details sont mis à jour en fonction de la polarité sélectionnée.

7. Renseignez les champs suivants avec les informations appropriées :

- Compound class
- CAS number
- Comments (par exemple, informations sur les classes de métabolites pouvant être ajoutées à ce champ.)

8. Ouvrez l'onglet Experimental Data.

9. Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff](#).
- Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt](#).

Ajouter une séquence peptidique

Utilisez des fichiers wiff et txt pour ajouter un spectre de référence à des entrées de la bibliothèque de composés.

Bibliothèque de composés

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Compound Library**.
La boîte de dialogue Compound Library apparaît.
2. Cliquez sur **New**, puis sélectionnez **Sequence** dans la liste.
La boîte de dialogue New Entry apparaît.
3. Saisissez le nom du composé dans le champ **Name**, puis cliquez sur **OK**.
Le logiciel renseigne automatiquement le nom saisi dans le champ **Compound name** dans la boîte de dialogue Compound Library.
4. Saisissez la séquence peptidique appropriée dans le champ **Sequence**.

Remarque : La séquence peut contenir des éléments personnalisés. Consultez la section [Custom Elements](#).

5. Cliquez dans le champ **Chemical formula**.

Le logiciel renseigne les champs suivants dans la boîte de dialogue Compound Library :

- Chemical formula
- Polarity
- Isotope Pattern

Par défaut, le champ **Adduct** affiche un adduit protoné à double charge $[M+2H]^{2+}$ ou $[M-2H]^{2-}$. Le logiciel met également à jour les informations appropriées dans le champ **m/z**.

6. Sélectionnez la polarité de l'acquisition dans le champ **Polarity**.
Le champ **Isotope Pattern** ainsi que les valeurs **m/z** et **Adduct** dans l'onglet Compound Details sont mis à jour en fonction de la polarité sélectionnée.
7. Cliquez sur l'onglet Experimental Data.
8. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff](#).
 - Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt](#).

Conventions de dénomination des séquences peptidiques

Tableau 3-1 : Séquences peptidiques

Caractéristique	Convention de saisie	Exemple
Chaînes multiples	/	LIGHTCHAIN / HEAVYCHAIN
Modification de l'acide aminé : groupe latéral	[Symbole]	M[Oxi]

Tableau 3-1 : Séquences peptidiques (suite)

Caractéristique	Convention de saisie	Exemple
Modification de l'acide aminé : extrémité C	-[Symbole]	Y-[Ami]
Modification de l'acide aminé : extrémité N	[Symbole]-	[1Me]-Y
Liaisons	<ul style="list-style-type: none"> [*#] sur chaque résidu lié Nombre sur chaque résidu lié 	Pont S-S : MYC[*1]PEPC[*1]TIDE

Tableau 3-2 : Liaisons

Type de liaison	Convention	Exemple
Pont S-S	Ajouter [*#] aux deux résidus du pont	Chaîne simple : MYC[*1]PEPC[*1]TIDE Chaînes multiples : LIGHTC[*1]HAIN / MC[*2]HEAVYC[*1]HAINC[*2]]AD
Pont ester/amide	Ajouter '[O-1]' à l'un des résidus de liaison	MYR[*1]PEPD[*1][O-1]TIDE
Cyclique	Ajouter '[H]' à l'extrémité C	M[*1]YCPEPCTIDE[*1]-[H]
Boucles : le résidu lié aux premier et dernier indices et les groupes terminaux ne font pas partie de la liaison de pontage.	Ajouter explicitement les groupes terminaux	[H]-C[*1]YCPEPCTIDC[*1]-[OH]

Ajouter une séquence d'oligonucléotide

Le cas échéant, ajoutez les informations du composé oligonucléotide dans la bibliothèque de composés. Les composés de la bibliothèque ont des spectres MS/MS qui seront utilisés lors du traitement.

Remarque : Si un composé est absent de la bibliothèque, l'utilisateur peut l'ajouter manuellement à une méthode de traitement.

Les séquences sont ajoutées au format texte. Pour capturer les différentes modifications d'oligonucléotide thérapeutique et les éléments personnalisés, respectez les règles de saisie des séquences. Consultez la section [Conventions de dénomination des séquences](#)

Bibliothèque de composés

d'[oligonucléotide](#). Pour une liste plus détaillée des modifications et éléments personnalisés, consultez la section [Custom Elements](#).

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Compound Library**.
2. Cliquez sur **New > Oligonucleotide Sequence**.
La boîte de dialogue New Entry apparaît.
3. Saisissez le nom de la séquence d'oligonucléotide dans le champ **Name**, puis cliquez sur **OK**.
4. Saisissez la séquence dans le tableau **Sequence**.

Remarque : La séquence peut contenir des éléments personnalisés. Consultez la section [Custom Elements](#).

5. Cliquez sur le champ **Chemical formula** pour mettre à jour la formule chimique automatiquement.
6. (Facultatif) Renseignez les champs de l'onglet Compound Details.
7. Cliquez sur l'onglet Experimental Data.
8. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff](#).
 - Pour ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt, continuez avec la section [Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt](#).

Conventions de dénomination des séquences d'oligonucléotide

Les séquences d'oligonucléotide peuvent être spécifiées à l'aide de lettres identifiant les bases :

- Adénine (A)
- Cytosine (C)
- Thymine (T)
- Guanine (G)
- Uracile (U)

Les types d'oligonucléotide, tels que l'acide désoxyribonucléique (DNA, d), l'acide ribonucléique (RNA, r), peuvent être identifiés par une lettre ajoutée au début de la séquence ou, pour les types d'oligonucléotide mélangés, intercalée entre les bases.

Pour les oligonucléotides contenant des nucléotides synthétiques, comme l'acide nucléique bloqué (LNA), utilisez le symbole complet pour chaque résidu lors de la définition de la séquence. Par exemple, IA pour LNA-A ou moA pour 2'-Mehtoxymethyl-A.

Les modifications de la chaîne principale, comme le phosphorothioate (HPSO, *), sont ajoutées à la fin de chaque base.

Les atomes lourds, comme le carbone 13 ($/^{13}\text{C}n/$), sont ajoutés après le résidu d'oligonucléotide spécifique, où n indique le nombre d'atomes lourds.

Remarque : Dans l'atome précédent, la notation « $/^{13}\text{C}n/$ » ajoute des atomes lourds à la formule existante. Elle ne remplace pas les atomes dans la base nucléique avec un libellé lourd. Pour définir une base nucléique libellée isotopiquement, une modification personnalisée est requise.

Utilisez une barre oblique (/) comme premier et dernière caractères pour identifier une modification personnalisée. Pour ajouter des modifications personnalisées et voir d'autres exemples d'utilisation des modifications ainsi que les conventions de dénomination associées, consultez la section [Custom Elements](#).

Tableau 3-3 : Conventions d'oligonucléotide

Caractéristique	Convention de saisie	Exemple
ADN	d	dACG T
ARN	r	rACG U
ADN et ANB mélangés	d	dACG T
Chaîne principale de phosphorothioate	*	dA*C*G* T*
Modification du sucre 2'Méthoxyméthyl (2'MOE)	mo	moAmoCmoG moT
Carbone 13	$/^{13}\text{C}n/$	dACG T/ $^{13}\text{C}2/$
Résidu de carbone	//	dACG /Autre résidu/

Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier wiff

1. Cliquez sur **Open wiff File**.
La boîte de dialogue Select Data apparaît.
2. Accédez à l'emplacement approprié, sélectionnez un fichier wiff qui contient un spectre pour le composé ajouté, puis cliquez sur **OK**.

Remarque : Ce fichier wiff doit contenir le composé en tant qu'ion précurseur.

Tableau 3-4 : Ajouter un spectre de référence

Fichier contenant plusieurs précurseurs	Fichier contenant un précurseur
<p>Si le fichier wiff sélectionné contient plusieurs précurseurs, la boîte de dialogue Select a Spectrum apparaît avec les informations suivantes dans le tableau Precursors pour chaque précurseur disponible :</p> <ul style="list-style-type: none"> • m/z • Time (min) • Quality • Charge 	<p>Si le fichier wiff ne contient qu'un précurseur, la fenêtre MS/MS Spectrum est mise à jour avec le spectre.</p>
<p>Cochez la case des filtres à appliquer.</p> <p>Sélectionnez une ou les deux options de filtre, le cas échéant. Le tableau Precursors n'affiche que les lignes qui répondent aux critères spécifiés.</p>	<p>Le logiciel utilise les paramètres m/z et Charge du précurseur sélectionné, ainsi que l'énergie de collision de l'expérience, pour créer une ligne unique d'informations dans le champ Spectra de la boîte de dialogue Compound Library. Par exemple, « Prec(m/z), CE(énergie de collision de l'expérience), Charge(Charge) » s'affiche dans le champ.</p> <p>L'intitulé du spectre contient la polarité (Polarity) et le nom du composé (Compound name) provenant du groupe Compound Information, suivi des informations du champ Spectra.</p> <p>Le champ Spectrum Details contient le type d'instrument, le temps de rétention, la charge et l'énergie de collision correspondant au spectre MS/MS sélectionné. Ces informations sont en lecture seule.</p>

Tableau 3-4 : Ajouter un spectre de référence (suite)

Fichier contenant plusieurs précurseurs	Fichier contenant un précurseur
<p>Sélectionnez une ligne dans le tableau Precursors.</p> <p>La fenêtre MS/MS Spectrum est mise à jour avec le spectre du précurseur sélectionné.</p> <hr/> <p>Conseil ! Tout en maintenant la touche Ctrl enfoncée, cliquez pour sélectionner plusieurs lignes. Si plusieurs lignes sont sélectionnées, le MS/MS Spectrum du premier précurseur sélectionné s'affiche.</p> <hr/>	—
<p>Si la case Charge state from est cochée, sélectionnez les valeurs from et to dans les options fournies. La valeur from est équivalente à l'état de charge disponible minimum dans le tableau Precursors. La valeur to est équivalente à l'état de charge disponible maximum dans le tableau Precursors.</p>	—
<p>Si la case Quality above est cochée, saisissez la valeur appropriée dans le champ fourni.</p>	—
<p>Cliquez sur OK.</p>	—

Tableau 3-4 : Ajouter un spectre de référence (suite)

Fichier contenant plusieurs précurseurs	Fichier contenant un précurseur
<p>Pour chaque ligne sélectionnée dans le tableau Precursors, le logiciel utilise les paramètres m/z et Charge du précurseur sélectionné, ainsi que l'énergie de collision de l'expérience, pour créer une ligne unique d'informations dans le champ Spectra de la boîte de dialogue Compound Library. Par exemple, « Prec(m/z), CE(énergie de collision de l'expérience), Charge(Charge) » s'affiche dans le champ.</p> <p>Les informations affichées dans le champ Spectra et le spectre affiché dans le champ MS/MS Spectrum correspondent à la première ligne sélectionnée dans le tableau Precursors.</p> <p>L'intitulé du spectre contient la polarité (Polarity) et le nom du composé (Compound name) provenant du groupe Compound Information, suivi des informations du champ Spectra.</p> <p>Le champ Spectrum Details contient le type d'instrument, le temps de rétention, la charge et l'énergie de collision correspondant au spectre MS/MS sélectionné. Ces informations sont en lecture seule.</p>	<p>—</p>

3. (Facultatif) Sélectionnez un autre spectre dans la liste **Spectra**.
Les champs **MS/MS Spectrum** et **Spectrum Details** sont mis à jour en fonction des informations sélectionnées.
4. Pour enregistrer un spectre comme le spectre prédéfini du composé, sélectionnez-le dans la liste **Spectra**, puis cliquez sur **Set as Reference**.
La mention - **Reference** est ajoutée aux informations affichées dans le champ **Spectra**.
Par exemple, « Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference » s'affiche dans le champ.
5. Cliquez sur **Save**.
6. Cliquez sur **OK**.
Le nouveau composé est enregistré dans la bibliothèque et la boîte de dialogue Compound Library se ferme.

Ajouter un spectre MS/MS de référence provenant d'un fichier txt

1. Cliquez sur **Open txt File**.
La boîte de dialogue Open txt File apparaît.
2. Accédez à l'emplacement approprié, sélectionnez le fichier txt d'un spectre MS/MS, puis cliquez sur **OK**.
La boîte de dialogue Spectrum Details s'affiche.
3. Saisissez les informations appropriées au spectre sélectionné, puis cliquez sur **OK**.

Le logiciel utilise les informations dans les champs **Precursor mass (m/z)**, **Collision energy** et **Charge** pour générer les informations dans le champ **Spectra** de la boîte de dialogue Compound Library. Par exemple, « Prec (masse du précurseur (m/z)), CE(énergie de collision), Charge(Charge) » s'affiche dans le champ.

L'information affichée dans le champ **Spectra** et le spectre affiché dans le champ **MS/MS Spectrum** correspondent au fichier txt sélectionné.

L'intitulé du spectre contient la polarité (**Polarity**) et le nom du composé (**Compound name**) provenant du groupe Compound Information, suivi des informations du champ **Spectra**.

Le champ **Spectrum Details** contient le type d'instrument, le temps de rétention, la charge et l'énergie de collision correspondant au spectre MS/MS sélectionné. Ces informations sont en lecture seule.

4. (Facultatif) Sélectionnez un autre spectre dans la liste **Spectra**.
Les champs **MS/MS Spectrum** et **Spectrum Details** sont mis à jour en fonction des informations sélectionnées.
5. Pour enregistrer un spectre comme le spectre prédéfini du composé, sélectionnez-le dans la liste **Spectra**, puis cliquez sur **Set as Reference**.
La mention - **Reference** est ajoutée aux informations affichées dans le champ **Spectra**.
Par exemple, « Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference » s'affiche dans le champ.
6. Cliquez sur **Save**.
7. Cliquez sur **OK**.
Le nouveau composé est enregistré dans la bibliothèque et la boîte de dialogue Compound Library se ferme.

Ajouter des informations à la bibliothèque de composés à partir d'un tableau de résultats

Remarque : Cette fonctionnalité n'est disponible que les fichiers de résultats Petite molécule et Peptide. Cette fonctionnalité n'est disponible que les fichiers de résultats ADC et Oligonucléotide.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.

Bibliothèque de composés

L'espace de travail Results apparaît.

2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Sélectionnez une ligne du tableau Potential Metabolites, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Add to Compound Library**.

Remarque : Si la ligne sélectionnée ne contient pas un spectre MS/MS, l'option **Add to Compound Library** n'est pas disponible.

6. Cliquez sur **OK** en réponse au message de confirmation.
7. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Compound Library**.
La boîte de dialogue Compound Library apparaît. Le métabolite ajouté est inclus dans la liste **Compound name**.

Ensembles de biotransformations 4

Les ensembles de biotransformations sont des listes de transformations communes.

À propos des biotransformations

Vous pouvez rechercher les métabolites prédits en utilisant les ensembles de biotransformations prédéfinis qui sont installés avec le logiciel, ou créer des ensembles de biotransformations. Par exemple, vous pouvez créer un ensemble pour chaque composé analysé. Les biotransformations installées contiennent des informations qui sont utilisées pendant la séquence ou la structure proposée automatiquement.

Les ensembles de biotransformations propres à une méthode sont utilisés par défaut pour chaque type de méthode. Par exemple, la méthode Peptide utilise les ensembles de biotransformations biologiques par défaut. Cet ensemble contient les biotransformations les plus pertinentes pour les réactions métaboliques in vivo des peptides.

Pour les oligonucléotides, sélectionnez l'un des trois ensembles de biotransformations prédéfinis :

- **Oligonucleotide Basic** : fournit une liste concise des modifications et se limite à celles qui n'ont un impact que sur la base ou la chaîne principale.
- **Oligonucleotide Comprehensive** : couvre intégralement toutes les transformations qui peuvent survenir lors de la synthèse, le métabolisme et le stockage.
- **Oligonucleotide Metabolites** : contient une partie de l'ensemble ciblant les transformations uniquement.

Tenez compte de l'origine de l'échantillon, puis choisissez l'ensemble le plus représentatif. Les utilisateurs peuvent créer leur propre ensemble de biotransformations à partir des entrées par défaut ou ajouter de nouvelles entrées. Consultez les sections [Créer un ensemble de biotransformations](#) et [Modifier un ensemble de biotransformations](#).

Créez des biotransformations personnalisées en identifiant une modification dans la formule chimique ou en combinant deux biotransformations.

Les biotransformations personnalisées ou issues d'un ensemble peuvent être incluses dans l'ensemble que vous créez.

Conseil ! Lorsque vous évaluez des données biologiques, sélectionnez les biotransformations les plus probables pour créer un petit ensemble afin d'accélérer l'analyse des données.

Créer un ensemble de biotransformations

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Biotransformations**.
La boîte de dialogue Biotransformations apparaît.

Ensembles de biotransformations

2. Cliquez sur **New**.
La boîte de dialogue New Biotransformation Set apparaît.
3. Saisissez le nom de l'ensemble dans le champ **Working biotransformation set**.
4. Cliquez sur **New Biotransformation**.
La boîte de dialogue New Biotransformation apparaît.
5. Saisissez le nom de la biotransformation dans le champ **Name**.
6. (Facultatif) Saisissez les informations appropriées concernant la biotransformation dans les champs **Description** et **Comments**.
7. Effectuez l'une des opérations suivantes :

Tableau 4-1 : Créer des ensembles de biotransformations

Pour créer une biotransformation	Pour créer une biotransformation combinée
Cliquez sur Single biotransformation .	Cliquez sur Combined biotransformation .
Identifiez la partie de la structure perdue dans le champ Formula from .	Sélectionnez une biotransformation dans chacun des champs Biotransformation 1 et Biotransformation 2 .
Saisissez la formule de la biotransformation dans le champ Formula to .	—

Remarque : Les biotransformations disponibles sont celles qui existent dans l'ensemble actif.

Remarque : Le logiciel calcule automatiquement la modification résultant de la biotransformation et renseigne cette valeur dans le champ **Mass shift**.

8. Cliquez sur **OK**.
La nouvelle biotransformation s'affiche dans l'ensemble de biotransformations actif et l'ensemble de biotransformations source.
9. Cliquez sur **OK** pour enregistrer le nouvel ensemble de biotransformations.
La boîte de dialogue New Biotransformation Set se referme.
10. Cliquez sur **OK**.
La boîte de dialogue Biotransformations se referme.

Modifier un ensemble de biotransformations

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Biotransformations**.
La boîte de dialogue Biotransformations apparaît.
2. Sélectionnez l'ensemble approprié dans la liste du champ **Set**.
3. Cliquez sur **Edit**.
La boîte de dialogue Edit Biotransformation Set s'ouvre et affiche le nom de l'ensemble sélectionné dans le champ **Working biotransformation set**.

4. Saisissez le nom de l'ensemble dans le champ **Working biotransformation set**.
5. Sélectionnez une ligne dans le tableau de l'ensemble de biotransformations actif.
6. Cliquez sur **Edit Biotransformation**.
La boîte de dialogue Edit Biotransformations apparaît.
7. (Facultatif) Apportez les modifications requises dans les champs **Name**, **Description** et **Comments**.
8. (Facultatif) Effectuez l'une des opérations suivantes :

Tableau 4-2 : Modifier les ensembles de biotransformations

Pour créer une biotransformation	Pour créer une biotransformation combinée
Cliquez sur Single biotransformation .	Cliquez sur Combined biotransformation .
Identifiez la partie de la structure perdue dans le champ Formula from .	Sélectionnez une biotransformation dans chacun des champs Biotransformation 1 et Biotransformation 2 .
Saisissez la formule de la biotransformation dans le champ Formula to .	—

Remarque : Les biotransformations disponibles sont celles qui existent dans l'ensemble actif.

9. Cliquez sur **OK**.
La biotransformation mise à jour s'affiche dans l'ensemble de biotransformations actif et l'ensemble de biotransformations source.
10. Cliquez sur **OK** pour enregistrer les modifications.
La boîte de dialogue Edit Biotransformation Set se referme.
11. Cliquez sur **OK**.
La boîte de dialogue Biotransformations se referme.

Supprimer un ensemble de biotransformations

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Biotransformations**.
La boîte de dialogue Biotransformations apparaît.
2. Sélectionnez l'ensemble approprié dans la liste du champ **Set**.
3. Cliquez sur **Delete**.
Un message de confirmation apparaît.
4. Cliquez sur **Yes**.
5. Cliquez sur **OK**.
La boîte de dialogue Biotransformations se referme.

Créer des méthodes de traitement 5

Le logiciel prend en charge quatre workflows : Petite molécule, Peptide, Oligonucléotide et ADC.

Vous devez créer une méthode contenant des paramètres de traitement propres au fichier d'échantillon analysé, pour identifier les métabolites potentiels dans cet échantillon.

Sélectionner le type de méthode



Sélectionner les valeurs des paramètres



Définir [Paramètres de traitement génériques](#)



Définir [Paramètres de traitement propres à un composé](#)

Paramètres de traitement

Dans le logiciel Molecule Profiler, les paramètres de traitement contiennent tous les attributs et valeurs qui permettent de traiter des fichiers wiff. La fonction de traitement sert à identifier et à caractériser les métabolites. Elle attribue également des scores de confiance aux métabolites.

Les modèles de paramètre de traitement utilisés sont les suivants :

- Petite molécule
- Peptides
- Oligonucléotides
- ADC

Les modèles représentent le composé et les types de workflow pris en compte pour les différents types d'analyse.

Remarque : Lors de l'ajout de séquences de composé, vérifiez que le format des noms de séquence est correct. Consultez la section [Conventions de dénomination des séquences peptidiques](#) ou [Conventions de dénomination des séquences d'oligonucléotide](#).

Sélectionner le type de méthode

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Processing Parameters**.

L'espace de travail Processing Parameters apparaît.

2. Cliquez sur **New**, puis sélectionnez le type de méthode dans la liste proposée.
3. Continuez avec l'étape 2 de la section [Sélectionner les valeurs des paramètres](#).

Sélectionner les valeurs des paramètres

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Processing Parameters**.
L'espace de travail Processing Parameters apparaît.
2. Saisissez les informations du composé dans l'espace de travail Processing Parameters.
 - Pour les workflows Petite molécule et ADC, cliquez sur **Open Structure** dans le groupe Structure, sélectionnez le fichier mol ciblé, puis importez la structure.
 - Pour les workflows Peptide et Oligonucléotide, indiquez la séquence appropriée dans le groupe Sequence.

Conseil ! Sinon, cliquez sur **Select From Library** pour sélectionner une entrée dans la bibliothèque de composés à intégrer dans la structure ou la séquence. Seules les entrées correspondant au workflow sont disponibles dans la liste. Consultez la section [Sélectionner un composé dans une bibliothèque](#).

3. Vérifiez que les paramètres **Polarity**, **Charge state** et **Adduct** ou **Ion type** sont appropriés à l'ensemble de données.
En général, les oligonucléotides sont acquis en mode polarité négative ou ion négatif. La plage de charges recommandée pour les oligonucléotides avec une masse inférieure ou égale à 10 000 Da est de -2 à -20. Le traitement des oligonucléotides avec des masses supérieures à 10 000 Da n'est pas recommandé.
4. Sélectionnez les stratégies de recherche de pics à utiliser pour trouver les métabolites potentiels. Consultez la section [À propos des stratégies de recherche de pics](#).
5. Configurez les paramètres qui sont indépendants du composé traité. Consultez la section [Paramètres de traitement génériques](#).
6. Configurez les paramètres qui sont indépendants du composé. Consultez la section [Paramètres de traitement propres à un composé](#).
7. Cliquez sur **Save and Close**.
8. Sélectionnez l'emplacement de stockage de la méthode dans le champ **Folder** de la boîte de dialogue Save Processing Parameters As.
9. Dans le champ **Name**, indiquez le nom de la méthode, puis cliquez sur **OK**.
La méthode est enregistrée et l'espace de travail Processing Parameters se referme.

Sélectionner un composé dans une bibliothèque

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Processing Parameters**.
L'espace de travail Processing Parameters apparaît.
2. Cliquez sur **Select From Library**.
La boîte de dialogue Select From Library apparaît.

Créer des méthodes de traitement

- Sélectionnez un composé dans la liste déroulante du champ **Compound name**.

Remarque : Pour les paramètres de traitement Petite molécule et ADC, seules les entrées identifiées comme des structures dans la bibliothèque de composés s'affichent dans la liste. Pour les paramètres de traitement Peptide et Oligonucléotide, seules les entrées identifiées comme des séquences dans la bibliothèque de composés s'affichent dans la liste.

- Cliquez sur **OK**.
L'espace de travail Processing Parameters est mis à jour avec les informations du composé sélectionné.
- Pour examiner ou modifier le spectre MS/MS de référence, cliquez sur **Compound-Specific Parameters > Product Ions and Neutral Losses**.

Remarque : Le spectre MS/MS du composé sélectionné s'affiche dans le volet Reference MS/MS Spectrum.

- (Facultatif) Si plusieurs spectres de référence sont disponibles, sélectionnez un autre spectre dans la liste, le cas échéant.

Remarque : Lorsqu'un autre spectre de référence est sélectionné, le volet Reference MS/MS Spectrum est mis à jour et les informations sont supprimées du tableau des ions produits et pertes neutres.

- Pour configurer le tableau des fragments, cliquez sur **Assign Fragments**.
- Continuez avec l'étape 5 de la section [Sélectionner les valeurs des paramètres](#).

À propos des stratégies de recherche de pics

Les stratégies de recherche de pics sont des algorithmes utilisés par le logiciel pour trouver les métabolites potentiels dans l'échantillon concerné. Les utilisateurs peuvent sélectionner des algorithmes dans le groupe Peak Finding Strategy pour traiter les données.

Algorithme	Description
TOF MS	

Algorithme	Description
Predicted metabolites	<ul style="list-style-type: none"> • Small molecule : avec cet algorithme, le logiciel recherche les métabolites en fonction de l'ensemble de biotransformations sélectionné, les métabolites de clivage prédits et une combinaison des deux. • Peptides : avec cet algorithme, le logiciel recherche les métabolites en fonction de l'ensemble de biotransformations, les métabolites prédits et une combinaison des deux. • Oligonucleotides : avec cet algorithme, le logiciel recherche les métabolites en fonction de l'ensemble de biotransformations, les catabolites prédits (y compris les produits de clivage hydrolytique, d'extrémité n+1 et n-1 internes) et une combinaison des deux. • ADC : avec cet algorithme, le logiciel recherche les métabolites en fonction des biotransformations, les clivages, les fragments d'anticorps et une combinaison des trois. <p>Consultez la section Paramètres de traitement génériques. Pour chaque méthode, les adduits disponibles sélectionnés dans le champ Available Adducts de l'onglet MS Parameters sont également inclus en cas d'utilisation des combinaisons.</p> <hr/> <p>Remarque : L'option Predicted metabolites est recommandée pour le traitement de données d'oligonucléotide.</p>
Generic peak finding	<p>Avec cet algorithme, le logiciel recherche les métabolites inattendus. Pour affiner la recherche, sélectionnez Apply mass defect filter ou Apply charge state filter.</p> <p>Les paramètres qui contrôlent cet algorithme se trouvent dans les onglets Chromatographic Data et MS Parameters. Consultez la section Paramètres de traitement génériques.</p> <hr/> <p>Remarque : Cette option, en conjonction avec l'option Predicted metabolites, est recommandée pour le traitement de données d'oligonucléotide.</p>
Apply mass defect filter	<p>Ce filtre limite la recherche aux pics qui correspondent aux filtres sélectionnés dans la plage Mass Defect spécifiée dans Compound-Specific Parameters. Lorsque ce filtre est sélectionné, seuls les métabolites trouvés par la recherche de pics générique et correspondant aux critères spécifiés sont inclus dans les résultats.</p>

Créer des méthodes de traitement

Algorithme	Description
Apply charge state filter	<p>Ce filtre limite la recherche aux pics avec une charge correspondant à la valeur indiquée dans l'onglet Charge state du groupe Compound Information. Lorsque ce filtre est sélectionné, seuls les métabolites trouvés par la recherche de pics générique et correspondant aux critères spécifiés sont inclus dans les résultats.</p> <hr/> <p>Remarque : Cette option n'est pas recommandée pour le traitement de données d'oligonucléotide.</p>
Mass defect	<p>Cet algorithme ne s'applique qu'aux méthodes Petite molécule.</p> <p>Cet algorithme utilise la masse fractionnelle pour filtrer les données. Le composé, les biotransformations sélectionnées et les métabolites de clivage potentiels contribuent tous aux filtres disponibles qui permettent de rechercher des métabolites correspondant à une plage de masses.</p> <p>Les paramètres qui contrôlent cet algorithme se trouvent dans l'onglet Mass Defect. Consultez la section Paramètres de traitement propres à un composé.</p>
Isotope pattern	<p>Cet algorithme recherche les métabolites dont le modèle isotopique est similaire au composé parent.</p> <hr/> <p>Conseil ! Si le composé est radiomarqué, les utilisateurs peuvent définir l'enrichissement isotopique dans la boîte de dialogue Processing Parameters en sélectionnant Compound-Specific Parameters > Isotope Pattern.</p> <hr/> <p>Les paramètres qui contrôlent cet algorithme se trouvent dans l'onglet Isotope Pattern. Consultez la section Paramètres de traitement propres à un composé.</p>
TOF MSMS	
<p>Remarque : Cet algorithme ne fonctionne que si la méthode de paramètre de traitement contient un spectre MS/MS de référence. Ce spectre MS/MS de référence peut provenir de l'entrée de la bibliothèque de composés ou être ajouté manuellement dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses. Consultez la section Paramètres de traitement propres à un composé.</p>	

Algorithme	Description
Find characteristic product ions	<p>Le logiciel utilise cet algorithme pour rechercher dans les données IDA et les données d'acquisition SWATH, les métabolites qui ont des ions produits caractéristiques dans le composé parent.</p> <p>Avec cet algorithme, les utilisateurs peuvent rechercher une partie ou l'ensemble des ions identifiés.</p> <p>Les paramètres qui contrôlent cet algorithme se trouvent dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses. Consultez la section Paramètres de traitement propres à un composé.</p>
All specified ions	<p>Lorsque cette option est sélectionnée, tous les ions identifiés sont recherchés. Par exemple, si quatre ions produits sont identifiés et que les pics ayant tous ces ions sont recherchés, seules les correspondances exactes sont identifiées comme des métabolites potentiels.</p>
At least __ ions	<p>Lorsque cette option est sélectionnée, seuls les ions sélectionnés dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses sont recherchés. Par exemple, si la recherche concerne les pics avec au moins deux ions, au moins deux des ions sélectionnés doivent être présents dans le spectre MS/MS du métabolite pour qu'un pic soit considéré comme un métabolite.</p>
Find characteristic neutral losses	<p>Le logiciel utilise cet algorithme pour rechercher les données IDA et les données d'acquisition SWATH des métabolites qui ont des pertes neutres par rapport au composé parent. Cet algorithme ne s'applique pas aux workflows Peptide et Oligonucléotide.</p> <p>Avec cet algorithme, les utilisateurs peuvent rechercher certaines ou l'ensemble des pertes. Par exemple, si quatre pertes neutres sont identifiées et que les pics ayant toutes ces pertes sont recherchés, seules les correspondances exactes sont identifiées comme des métabolites potentiels. Par exemple, si la recherche concerne les pics avec au moins deux pertes, au moins deux des pertes sélectionnées doivent être présentes dans le spectre MS/MS du métabolite pour qu'un pic soit considéré comme un métabolite.</p> <p>Les paramètres qui contrôlent cet algorithme se trouvent dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses. Consultez la section Paramètres de traitement propres à un composé.</p>
All specified losses	<p>Lorsque cette option est sélectionnée, tous les métabolites sont recherchés et toutes les pertes neutres sont détectées.</p>

Créer des méthodes de traitement

Algorithme	Description
At least __ losses	Lorsque cette option est sélectionnée, seules les pertes sélectionnées dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses sont recherchées. Par exemple, si quatre pertes neutres sont identifiées et que les pics ayant toutes ces pertes sont recherchés, seules les correspondances exactes sont identifiées comme des métabolites potentiels. Par exemple, si la recherche concerne les pics avec au moins deux pertes, au moins deux des pertes sélectionnées doivent être présentes dans le spectre MS/MS du métabolite pour qu'un pic soit considéré comme un métabolite.
Consider internal neutral losses	Cet algorithme ne concerne que les données d'acquisition SWATH. Cette stratégie ne fonctionne que si au moins deux pertes neutres sont sélectionnées. La perte neutre interne est égale au delta entre les deux formules de pertes neutres. Notez qu'une formule de perte neutre doit être un sous-ensemble de l'autre formule de perte neutre pour que l'option « Find by Internal Neutral Loss » soit opérationnelle.
Isotope pattern (SWATH Only)	Cet algorithme ne concerne que les données d'acquisition SWATH. Les précurseurs avec un modèle isotopique de fragment correspondant à celui sélectionné dans le tableau de l'onglet Product Ions and Neutral Losses de la boîte de dialogue Compound-Specific Parameters sont identifiés comme des métabolites. L'utilisateur doit cocher au moins une des cases de formule isotopique de fragment dans la colonne Isotope Pattern . Le modèle isotopique de fragment expérimental doit correspondre au modèle isotopique de fragment théorique dans la tolérance de m/z MS/MS et la tolérance d'intensité spécifiées dans l'onglet MS/MS Parameters, pour que le pic soit considéré comme un métabolite.

Paramètres de traitement génériques

Les paramètres génériques sont des paramètres indépendants du composé en cours de traitement. Chacun des onglets suivants gère des paramètres génériques :

Paramètres génériques



Petites molécules

[Onglet
Biotransformations](#)



Peptides

[Onglet
Biotransformations](#)



Oligonucléotides

[Onglet
Biotransformations](#)



ADC

[Onglet
Biotransformations](#)

Onglet Chromatographic Data	Onglet Chromatographic Data	Onglet Chromatographic Data	Onglet Chromatographic Data
Onglet MS Parameters	Onglet MS Parameters	Onglet MS Parameters	Onglet MS Parameters
Onglet MS/MS Parameters	Onglet MS/MS Parameters	Onglet MS/MS Parameters	Onglet MS/MS Parameters
Onglet Formula Prediction (méthodes Petite molécule et ADC)	Onglet Confirmation Scoring	Onglet Confirmation Scoring	Onglet Formula Prediction (méthodes Petite molécule et ADC)
Onglet Confirmation Scoring			Onglet Confirmation Scoring

Onglet Biotransformations

Identifie l'ensemble contenant les biotransformations concernées. Le logiciel inclut les ensembles de biotransformations prédéfinis. Pour créer un ensemble de biotransformations personnalisé, consultez la section [Créer un ensemble de biotransformations](#).

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
Select Set	<p>Sélectionnez un autre ensemble de biotransformations à utiliser pour le traitement, dans la base de données.</p> <p>Lorsque cette option est sélectionnée, le logiciel peut afficher l'avertissement suivant : « The selected biotransformation set might no longer exist in the biostransformations database. » Cela survient parce que l'ensembles de biotransformations sélectionné a été enregistré dans le fichier des paramètres de traitement. Les modifications apportées ultérieurement à l'ensemble de biotransformations dans l'espace de travail Biotransformations ne sont pas enregistrées dans le fichier des paramètres de traitement.</p> <p>Pour relancer le traitement à l'aide de l'ensemble de biotransformations enregistré, cliquez sur OK, puis sur Cancel dans la boîte de dialogue Biotransformations. Pour mettre à jour le fichier des paramètres de traitement avec un nouvel ensemble de biotransformations, procédez comme suit :</p> <ol style="list-style-type: none">1. Cliquez sur OK.2. Sélectionnez un ensemble de biotransformations. Le message suivant s'affiche : « If you select this new biotransformation set, you might not be able to re-select the existing set. Do you want to continue? ».3. Cliquez sur OK.

Onglet Chromatographic Data

Paramètre	Description
Chromatographic Peak	

Paramètre	Description
Retention time window	<p>Spécifie la plage des temps de rétention pour rechercher les métabolites potentiels. La taille de la fenêtre de temps de rétention (RT) est directement proportionnelle au temps de traitement.</p> <p>Spécifiez une valeur supérieure à 0,00 min pour exclure le volume vide de la colonne.</p> <p>La valeur to doit être supérieure à la valeur from.</p> <p>Nous recommandons de définir une fenêtre de temps de rétention pour tous les workflows, car une plage importante peut augmenter considérablement les temps de traitement. Les plages dépendent grandement de l'expérience analysée. Examinez la fenêtre de temps de rétention pour chaque expérience. Nous recommandons que l'heure de début soit légèrement postérieure à 0,00 min et que l'heure de fin soit légèrement postérieure au pic concerné, ou lorsque la méthode entre dans la phase de lavage ou d'élution élevée du gradient.</p>
MS data	<p>Spécifie la méthode pour définir la largeur du XIC.</p> <ul style="list-style-type: none"> • XIC width : spécifie la largeur du chromatogramme d'ions extraits (XIC) à prendre en compte pour le traitement. • Automatic : le logiciel calcule la meilleure largeur en fonction des données sélectionnées. <p>Le paramètre Automatic est recommandé pour les workflows Oligonucléotide.</p> <hr/> <p>Remarque : Si cette option est sélectionnée lorsque les données d'acquisition SWATH sont en cours de traitement, l'option XIC width est appliquée.</p> <hr/>
LC peak separation	<p>Détermine la profondeur d'intégration des pics d'élution. Ce paramètre traite également les pics chromatographiques avec une trainée significative.</p> <p>Diminuez la valeur de ce paramètre s'il s'agit de pics étroitement élués. Un réglage moins élevé permet de prendre en compte des pics séparément, au lieu d'un seul pic.</p>
TOF MS	
Minimum peak width	<p>Exclut les pics chromatographiques dont la largeur est inférieure à cette valeur.</p> <p>Diminuez cette valeur pour inclure les pics étroits.</p>

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
Minimum peak intensity	<p>Ne prend pas en compte les pics chromatographiques dont l'intensité TOF MS est inférieure à la valeur spécifiée.</p> <p>À utiliser en présence de données chromatographiques bruyantes. En réglant un seuil juste au-dessus du niveau de bruit, il est possible de rejeter les pics qui résultent probablement du bruit.</p> <p>Examinez les largeurs de pic avant de traiter les données dans le logiciel Molecule Profiler ou dans un logiciel de visualisation, comme l'espace de travail Explorer dans SCIEX OS. Utilisez une moyenne générale de tous les pics examinés pour calculer la largeur minimum.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS ou IDA, une valeur de 50 cps est recommandée.</p>
Use smoothing	<p>Différencie les pics du bruit en éliminant la variation d'intensité dans le bruit.</p> <p>À sélectionner en présence de données chromatographiques bruyantes.</p> <p>Cette option est recommandée pour les workflows Oligonucléotide.</p>
Sample-control offset	<p>Aligne les chromatogrammes de contrôle et de l'échantillon MS. Lors du traitement, le logiciel décale tous les contrôles avant de les comparer à l'échantillon.</p>
Sample/control ratio	<p>Spécifie la largeur qu'un pic d'échantillon doit avoir lors de la comparaison au contrôle pour être considéré comme un métabolite.</p>
TOF MS/MS	
Minimum peak intensity	<p>Ce paramètre n'est utilisé que lors du traitement des données d'acquisition SWATH, avec des algorithmes de recherche de pics MS/MS. Ce paramètre n'est pas utilisé lors du traitement de données IDA.</p> <p>Ne prend pas en compte les pics chromatographiques dont l'intensité TOF MS/MS est inférieure à la valeur spécifiée.</p> <p>À utiliser en présence de données chromatographiques bruyantes. En réglant un seuil juste au-dessus du niveau de bruit, il est possible de rejeter les pics qui résultent probablement du bruit.</p>
Analog data	
Wavelength (UV only)	<p>Sélectionne la longueur d'onde à utiliser lors de la confirmation des métabolites potentiels.</p>

Paramètre	Description
Time offset from MS	<p>Aligne les données chromatographiques MS et analogiques. Lors du traitement, le logiciel décale les données analogiques avant de les comparer aux données MS.</p> <hr/> <p>Remarque : Les données chromatographiques MS et analogiques peuvent aussi être alignées (post-traitement) dans l'espace de travail Analog Interpretation. Consultez la section Modifier le décalage du T.R.</p>
LC peak separation	<p>Détermine la profondeur d'intégration des pics d'élution. Ce paramètre traite également les pics chromatographiques avec une trainée significative.</p> <p>Diminuez la valeur de ce paramètre s'il s'agit de pics étroitement élués. Un réglage moins élevé permet de prendre en compte des pics séparément, au lieu d'un seul pic.</p>
Minimum peak width	<p>Exclut les pics chromatographiques dont la largeur est inférieure à cette valeur.</p> <p>Diminuez cette valeur pour inclure les pics étroits.</p>
Minimum peak intensity	<p>Ne prend pas en compte les pics chromatographiques dont l'intensité est inférieure à la valeur spécifiée.</p> <p>À utiliser en présence de données chromatographiques bruiteuses. En réglant un seuil juste au-dessus du niveau de bruit, il est possible de rejeter les pics qui résultent probablement du bruit.</p>
Use smoothing	<p>Différencie les pics du bruit en éliminant la variation d'intensité dans le bruit.</p> <p>À sélectionner en présence de données chromatographiques bruiteuses.</p>
Sample-control offset	<p>Aligne les chromatogrammes de contrôle et de l'échantillon MS. Lors du traitement, le logiciel décale tous les contrôles avant de les comparer à l'échantillon.</p>

Onglet MS Parameters

Paramètre	Description
m/z Tolerance	

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
MS m/z tolerance	<p>Spécifie une plage pour déterminer les pics dans le spectre MS. Toutes les masses comprises dans cette plage seront considérées comme un seul et même pic. Pour un pic avec une formule expérimentale à considérer comme un métabolite potentiel, la précision de masse doit être comprise dans la tolérance spécifiée.</p> <p>Ce paramètre dépend en grande partie de l'état d'étalonnage de l'instrument. Pour les instruments étalonnés à ± 3 ppm, une valeur de 10 ppm est recommandée pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS ou IDA.</p>
Minimum MS peak intensity	<p>Spécifie le seuil de spectre minimum pour l'intensité du pic MS. Supprime les pics MS dont l'intensité est inférieure au seuil de spectre spécifié des éléments pris en compte.</p> <p>Définissez la valeur en fonction du niveau de bruit dans le spectre.</p>
Isotope Pattern Tolerances	
MS m/z tolerance	<p>Spécifie la tolérance appliquée au modèle isotopique des métabolites. Seuls les pics avec des valeurs de décalage m/z d'isotope respectant cette tolérance sont considérés comme correspondants.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS ou IDA, une valeur de 10 mDa est recommandée.</p>
Intensity tolerance	<p>Spécifie la tolérance relative des intensités isotopiques telle qu'elle est définie dans l'onglet Isotope Pattern de la boîte de dialogue Compound-Specific Parameters. Pour être considéré comme une correspondance, le ratio d'intensité de deux pics doit être égal au ratio prévu dans cette tolérance.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS ou IDA, une valeur de 20 % est recommandée.</p>
Minimum Score	<p>(Méthodes Oligonucléotide) Spécifie la tolérance de correspondance minimale (en pourcentage) du modèle isotopique observé d'un métabolite, par rapport à son modèle isotopique attendu. Nous recommandons de commencer par une valeur de 0 %, puis d'augmenter cette valeur en fonction des besoins pour supprimer les fausses identifications positives.</p>
Limits	

Paramètre	Description
Maximum number of unexpected metabolites	<p>Sélectionnez le nombre maximum de pics inattendus pouvant être identifiés comme des métabolites potentiels.</p> <p>Ce paramètre affecte le nombre maximum de pics que la recherche de pics générique peut identifier. Cette fonction interagit avec la recherche de pics de métabolites prédits. Par exemple, si un ensemble de biotransformations plus petit est sélectionné pour un échantillon complexe, le nombre maximum de métabolites inattendus sera élevé. Donc ce paramètre devra être augmenté. En général, pour traiter des échantillons d'oligonucléotide avec impuretés, une valeur de 100 est recommandée. Pour des échantillons plus complexes, cette valeur doit être augmentée.</p>
Mass range window (m/z)	Limite la plage de masses dans laquelle rechercher les métabolites potentiels.
Generic LC/MS Peak Finding	
Perform background subtraction	<p>Spécifie si la soustraction du bruit de fond doit être appliquée. Sélectionnez cette option pour supprimer les ions de bruit de fond si le niveau de bruit de fond est élevé dans le chromatogramme LC/MS.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS et TOF MS/MS, cette option n'est pas recommandée.</p>
Available Adducts (Méthodes Petite molécule)	
Liste de tous les adduits pris en charge, en fonction de la plage de charge définie dans le groupe Compound Information.	
Use	Indique si les adduits doivent être inclus dans la recherche.
__ adduct(s) selected	(Lecture seule) Indique le nombre d'adduits sélectionnés dans la colonne Use du tableau Available Adducts.
Advanced Ion Types (Méthodes ADC, Peptide et Oligonucléotide)	
Use	Indique si les ions doivent être inclus dans la recherche.
__ adduct(s) selected	(Lecture seule) Indique le nombre d'ions sélectionnés dans la colonne Use du tableau Advanced Ion Types.

Onglet MS/MS Parameters

Paramètre	Description
MS/MS Finding	

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
MS/MS m/z tolerance	<p>Spécifie une plage pour déterminer les pics dans le spectre MS/MS. La tolérance de <i>m/z</i> MS/MS est la tolérance dans laquelle les pics de fragment trouvés dans le spectre MS/MS doivent correspondre aux fragments sélectionnés ou aux pertes neutres spécifiées dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses de la boîte de dialogue Compound-Specific Parameters, afin que le pic de précurseur correspondant puisse être considéré comme un métabolite potentiel.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS/MS ou IDA, une valeur de 10 mDa est recommandée.</p>
Minimum MS/MS peak intensity	<p>Ne tient pas compte des pics MS/MS dont l'intensité est inférieure au seuil de spectre spécifié.</p> <p>Définissez la valeur en fonction du niveau de bruit dans le spectre.</p>
MS/MS Isotope Finding	
MS/MS m/z tolerance	<p>Spécifie une plage pour déterminer les pics dans le spectre MS/MS. Pour les pics du spectre MS/MS à considérer comme correspondants, la différence de masse entre les pics isotopiques doit être égale à la différence attendue dans cette tolérance.</p> <p>La tolérance de <i>m/z</i> MS/MS est utilisée lors du traitement des données d'acquisition SWATH avec la stratégie de recherche de pics Isotope Pattern (SWATH uniquement) sélectionnée.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS/MS ou IDA, une valeur de 10 mDa est recommandée.</p>
Intensity tolerance	<p>Spécifie la tolérance relative autour des intensités isotopiques des formules de fragment sélectionnées, telle qu'elle est définie dans la cellule IP sélectionnée dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses de la boîte de dialogue Compound-Specific Parameters. Pour être considéré comme une correspondance, le ratio d'intensité de deux pics doit être égal au ratio prévu dans cette tolérance. Ce paramètre définit également l'isotope le plus petit, considéré comme une partie du modèle. Par exemple, si la tolérance d'intensité est de 10 %, l'isotope le plus petit pouvant contribuer au modèle de masse doit être supérieur d'au moins 10 % du pic défini comme égal à 100 %.</p> <p>Le paramètre Intensity tolerance est utilisé lors du traitement des données d'acquisition SWATH avec la stratégie de recherche de pics Isotope Pattern (SWATH uniquement) sélectionnée.</p> <p>Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS/MS ou IDA, une valeur de 20 % est recommandée.</p>
Source of Reference MS/MS Spectrum	

Paramètre	Description
Control	Sélectionnez un spectre de référence pour le composé concerné. Le spectre peut être sélectionné dans différents emplacements. Le spectre de référence est sélectionné par défaut. Nous recommandons de sélectionner l'option Selected reference spectrum lorsque la fonction de génération automatique d'une structure ou d'une séquence est utilisée.
Sample	
Selected reference spectrum	
MS/MS Spectrum	
Use advanced MS/MS filter	Ce filtre n'est utilisé que pour les données d'acquisition SWATH. Les algorithmes utilisés par ce filtre incluent PCVG qui permet d'attribuer des fragments d'un spectre MS/MS à un précurseur particulier pour les données d'acquisition SWATH. Seuls les fragments pouvant être attribués au précurseur s'affichent dans le spectre MS/MS, selon la position du curseur (Comprehensive ou Confident).
Similarity and Fragment Interpretation	
MS/MS m/z tolerance	Sélectionnez une tolérance de précision de masse pour comparer le spectre MS/MS de référence au spectre MS/MS du métabolite. Ce paramètre est également utilisé lorsque des fragments sont attribués dans le tableau Interpretation. La précision de masse des fragments attribués doit être comprise dans la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS fournie. Pour les méthodes Oligonucléotide contenant des expériences TOF MS/MS ou IDA, une valeur de 10 ppm est recommandée.
Minimum signal-to-noise ratio	Sélectionnez un rapport signal/bruit minimum pour comparer le spectre MS/MS de référence au spectre MS/MS du métabolite. Ce paramètre est également utilisé lorsque des fragments sont attribués dans le tableau Interpretation. Le rapport signal/bruit des fragments attribués doit être supérieur au rapport signal/bruit minimum fourni.
Fragment Interpretation Options (Méthodes Petite molécule et Peptide)	
Number of fragment peaks selected for assignment	(Méthodes Petite molécule) Spécifie le nombre de fragments MS/MS qui seront sélectionnés pour être attribués. Les pics sont sélectionnés en fonction de leur intensité (les pics les plus intenses sont sélectionnés en premier).
Break aromatic rings	(Méthodes Petite molécule) Rompt les liaisons qui forment une partie d'un anneau aromatique.
Maximum number of bonds to break	(Méthodes Petite molécule) Spécifie le nombre maximum de liaisons à rompre lors de l'attribution de fragments MS/MS à des fins d'interprétation.

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
Maximum number of C-C bonds to break	(Méthodes Petite molécule) Spécifie le nombre maximum de liaisons C-C à rompre lors de l'attribution de fragments MS/MS à des fins d'interprétation.
Fragment Types	(Méthodes Peptide) Identifie le type de fragment. Vous pouvez sélectionner plusieurs types.
Maximum bonds to break	(Méthodes Peptide) Spécifie le nombre maximum de liaisons à rompre.
Break linkages	(Méthodes Peptide) Rompt les liaisons dans la séquence de peptide ou d'oligonucléotide.

Onglet Formula Prediction (méthodes Petite molécule et ADC)

Paramètre	Description
Search Constraints	
Elements from Elements to	Spécifie l'élément de départ que le logiciel va utiliser pour proposer des formules pour les métabolites potentiels.
Isotope Pattern Tolerances	
MS m/z tolerance	Dès que le logiciel a identifié un modèle isotopique théorique pour une formule proposée, ce paramètre limite la différence de masse autorisée entre les isotopes lors de la comparaison au modèle isotopique du métabolite.
Intensity tolerance	Dès que le logiciel a identifié un modèle isotopique théorique pour une formule proposée, cette valeur limite la différence autorisée de l'intensité du pic isotopique lors de la comparaison au modèle isotopique du métabolite.
Ranking	
Contribution	Spécifie si les formules basées sur le spectre MS ou sur le spectre MS/MS doivent figurer dans les résultats.
Automatically weight MS/MS	Sélectionnez cette option pour appliquer une échelle logarithmique à la pondération MS/MS.
Rings and Double Bonds	
RDB from RDB to	Identifie une plage d'anneaux et de doubles liaisons dans les formules proposées des métabolites potentiels. Si le nombre d'anneaux et de doubles liaisons d'une formule proposée ne correspond pas à la plage spécifiée, cette formule ne sera pas prise en compte pour le métabolite. La valeur minimum doit être inférieure à la valeur maximum.

Paramètre	Description
Element Ratios	
Oxygen/ phosphorus count	Spécifie la plage de molécules d'oxygène-phosphore qui doivent être présentes dans les formules proposées. Ce paramètre s'applique aux formules MS et MS/MS.
Oxygen/sulphur count	Spécifie la plage de molécules d'oxygène-soufre qui doivent être présentes dans les formules proposées. Ce paramètre s'applique aux formules MS et MS/MS.

Onglet Confirmation Scoring

Lorsqu'un métabolite potentiel est trouvé dans l'échantillon, le logiciel lui attribue un score de confirmation qui indique la probabilité que le pic trouvé est un métabolite. Ce score est indépendant des algorithmes utilisés pour trouver des métabolites et repose sur différentes propriétés.

Remarque : Pour les méthodes Oligonucléotide, une valeur de 100 est recommandée pour **Isotope pattern** et de 0 pour tous les autres paramètres.

Paramètre	Description
Mass defect	(Méthodes Petite molécule) Indique le taux de correspondance entre le défaut de masse du métabolite et celui du composé parent, des métabolites de clivage potentiels ou des métabolites de phase II. Remarque : Cet attribut n'est pas utilisé pour calculer le score total de confirmation des données ADC, Peptide et Oligonucléotide.
Isotope pattern	(Méthodes Petite molécule et ADC) Indique si le métabolite a un modèle isotopique similaire à celui du composé parent. Cette propriété a un score compris entre 0 et 100. (Méthodes Oligonucléotide) Indique si le métabolite a un modèle isotopique similaire à celui attendu. Ce paramètre est très utile pour filtrer les faux positifs. Une valeur de 100 est recommandée.

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
MS/MS	<p>Indique la proximité du spectre MS/MS par rapport au spectre de référence. Cette propriété ne s'applique que si un spectre de référence est disponible.</p> <p>Le score MS/MS a deux composantes :</p> <ul style="list-style-type: none">• Qualité : une mesure de la capacité à différencier les pics du bruit de fond.• Similarité : le logiciel calcule la proximité du spectre MS/MS avec le spectre de référence, notamment les ions produits qui ont été décalés en fonction des biotransformations connues. <hr/> <p>Remarque : Si les données traitées ne sont que de type MS TOF, réglez ce paramètre sur 0.</p>
Mass accuracy	Indique la proximité entre la valeur m/z trouvée et la valeur m/z attendue. Cette propriété ne s'applique qu'aux métabolites prédits.
Total confirmation score	(Lecture seule) Total des valeurs des quatre propriétés.

Conseil ! Saisissez 0 dans le tableau Scoring pour ignorer une propriété dans le calcul du score.

Paramètres de traitement propres à un composé

Les paramètres de traitement propres à un composé sont des paramètres qui dépendent du composé en cours de traitement. Chacun des onglets suivants gère des paramètres propres à un composé :

Paramètres propres à un composé

↙	↙	↘	↘
Petites molécules	Peptides	Oligonucléotides	ADC
Onglet Cleavage Metabolites (méthodes Petite molécule et ADC)	Onglet Catabolites (méthodes Peptide)	Onglet Catabolites (méthodes Oligonucléotide)	Onglet Cleavage Metabolites (méthodes Petite molécule et ADC)
Onglet Mass Defect (méthodes Petite molécule)	Onglet Isotope Pattern	Onglet Isotope Pattern	Onglet Isotope Pattern
Onglet Isotope Pattern	Onglet Product Ions and Neutral Losses	Onglet Product Ions and Neutral Losses	Onglet Product Ions and Neutral Losses

Onglet Cleavage Metabolites (méthodes Petite molécule et ADC)

Identifie les métabolites de clivage potentiels du composé parent. La méthode doit contenir une structure pour que le logiciel puisse générer une liste des métabolites de clivage potentiels.

Paramètre	Description
Potential Compound Cleavages	
Maximum bonds to break	Spécifie le nombre maximum de liaisons à rompre.
Break ring bonds	Rompt les liaisons qui font partie d'un anneau.
Only break C-N bonds	Ne rompt que les liaisons C-N.
Cleavages selected	Indique le nombre de clivages sélectionnés dans le tableau des clivages de composé potentiels. Valeur générée automatiquement par le logiciel.

Onglet Catabolites (méthodes Peptide)

Identifie les clivages hydrolytiques potentiels du composé parent. La méthode doit contenir une séquence peptidique pour que le logiciel puisse générer une liste des catabolites hydrolytiques potentiels.

Paramètre	Description
Potential Hydrolytic Cleavages	
Max. peptide bonds to break	Spécifie le nombre maximum de liaisons peptidiques à rompre.
Max. cross-links to break	Spécifie le nombre maximum de liaisons croisées à rompre.
Min. AA count	Spécifie le nombre minimum d'acides aminés dans le catabolite.
Catabolites selected	(Lecture seule) Indique le nombre de catabolites sélectionnés dans le tableau des clivages hydrolytiques potentiels.

Onglet Catabolites (méthodes Oligonucléotide)

Identifie les clivages hydrolytiques potentiels du composé parent. La méthode doit contenir une séquence peptidique pour que le logiciel puisse générer une liste des catabolites hydrolytiques potentiels.

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
Potential Hydrolytic Cleavages	
Max. bonds to break	Spécifie le nombre maximum de liaisons pouvant être rompues le long de la chaîne principale d'oligonucléotide uniquement, y compris la perte de H ₂ PO ₃ . Pour les pertes de bases nucléiques et de sucre, consultez la section Onglet Biotransformations .
Min. Nucleotides	Spécifie le nombre minimum de nucléotides utilisés pour générer les catabolites potentiels et les clivages hydrolytiques.
Include terminus n+1 sequences	Spécifie s'il faut rechercher les impuretés n+1 de l'extrémité.
Include internal n-1 sequences	Spécifie s'il faut rechercher les impuretés n-1 de l'extrémité.
Catabolites selected	(Lecture seule) Indique le nombre de catabolites sélectionnés dans le tableau des clivages hydrolytiques potentiels.

Onglet Mass Defect (méthodes Petite molécule)

Lorsque des échantillons biologiques complexes sont analysés, ces filtres permettent de supprimer les interférences d'arrière-plan.

Paramètre	Description
Mass Defect Filters	
Filters selected	Indique le nombre de filtres de défaut de masse sélectionnés dans le tableau correspondant. Valeur générée automatiquement par le logiciel.
Filters	
Parent	Sélectionné par défaut.
Glucuronidation	Sélectionné par défaut.
Bis-Glucuronidation	Sélectionné par défaut.
Glutathione	Sélectionné par défaut.
Sulphate	Sélectionné par défaut.

Onglet Isotope Pattern

Paramètre	Description
Isotope Pattern	<p>Affiche une représentation graphique des informations figurant dans le tableau Isotopes.</p> <p>(Méthodes pour oligonucléotides) Affiche une représentation graphique de la distribution isotopique de l'oligonucléotide, à un état de charge spécifié. Pour modifier l'état de charge, sélectionnez un autre type d'ion dans le champ Ion type de la boîte de dialogue Compound Information.</p>
Isotopic Enrichment	<p>Spécifie l'enrichissement isotopique d'un atome qui sera utilisé dans la formule du composé parent.</p> <hr/> <p>Remarque : Pour ajouter un élément isotopique dans les méthodes ADC ou Petite molécule, importez le fichier mol qui contient l'isotope.</p> <hr/> <p>Remarque : Pour modifier l'enrichissement isotopique des formules de peptide et d'oligonucléotide avec atomes enrichis, consultez la section Modifier l'enrichissement isotopique des formules de peptide et d'oligonucléotide.</p> <hr/>
Isotopes	Affiche les isotopes les plus intenses, selon la formule et l'enrichissement isotopique, le cas échéant, du composé parent.
Isotope Pattern Intensity Cutoff for Metabolite XICs (%)	(Méthodes Oligonucléotide) Spécifie la valeur de coupure, en intensité de pourcentage, qui est appliquée lors du calcul de l'aire du pic à chacun des isotopes considérés pour l'extraction du XIC. Les isotopes dont les intensités sont inférieures à la valeur de coupure s'affichent en rouge dans le tableau.

Onglet Product Ions and Neutral Losses

Paramètre	Description
Reference MS/MS Spectrum	<p>Identifie le spectre à utiliser lors de la sélection des ions produits et des pertes neutres à faire correspondre au spectre MS/MS des métabolites potentiels. La meilleure source est le fichier de données d'un échantillon acquis dans des conditions similaires à l'échantillon concerné.</p> <p>Le spectre peut être sélectionné dans l'un de ces deux emplacements :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Fichier .wiff • Bibliothèque de composés
Filters	

Créer des méthodes de traitement

Paramètre	Description
m/z From __ to __	Définit la plage de masses prise en compte pour renseigner le tableau Product Ions and Neutral Losses. Seuls les fragments compris dans la plage sélectionnée s'affichent dans le tableau Product Ions and Neutral Losses.
Charge state From __ to __	Définit la plage d'états de charge prise en compte pour renseigner le tableau Product Ions and Neutral Losses. Seuls les fragments dont la charge respecte la plage sélectionnée s'affichent dans le tableau Product Ions and Neutral Losses.
Only show product ions above (%)	Définit le seuil minimum des ions produits à inclure dans le tableau Product Ions and Neutral Losses. Ne prend pas en compte les ions produits dont l'intensité est inférieure à la valeur spécifiée.
Mass accuracy within (mDa)	Seuls les fragments dont la précision de masse correspond à la valeur spécifiée s'affichent dans le tableau Product Ions and Neutral Losses.
Add product ions, neutral losses from Phase II metabolites	(Méthodes Petite molécule et ADC) Inclut les ions produits et les pertes neutres des métabolites de phase II dans le tableau Product Ions and Neutral Losses.

Remarque : Une fois les filtres modifiés, cliquez sur **Assign Fragments** pour mettre à jour le tableau Product Ions and Neutral Losses.

Détails de l'anticorps

Remarque : Ces paramètres propres à un composé ne concernent que les méthodes ADC.

Paramètre	Description
Protein Sequence	Séquence de protéines de l'anticorps.
Enzyme	Enzyme à utiliser pour digérer la protéine.
Break disulfide bonds	Les liaisons disulfures sont rompues lorsque cette case est cochée.
Site of conjugation	Acide aminé dans l'anticorps auquel la molécule médicament peut être conjuguée.
Type of conjugation	Chimie impliquée dans la conjugaison de la molécule médicament à l'anticorps.
Max. AA count	Nombre maximum d'acides aminés à prendre en compte comme des fragments potentiels, après la digestion.

Paramètre	Description
Selected fragments	Valeur générée automatiquement par le logiciel. Indique le nombre de fragments sélectionnés dans le tableau.

Modifier l'enrichissement isotopique des formules de peptide et d'oligonucléotide

Condition préalable

Un acide aminé personnalisé, avec ou sans modification personnalisée, doit être créé. Consultez les sections [Créer un acide aminé personnalisé](#) et [Créer une modification d'acide aminé personnalisé](#). L'acide aminé personnalisé et la modification d'acide aminé personnalisé doivent contenir au moins un isotope enrichi.

1. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Processing Parameters..**
L'espace de travail Processing Parameters apparaît.
2. Cliquez sur **New > Peptides** ou sur **New > Oligonucleotide**

Remarque : Sinon, sélectionnez une entrée dans la bibliothèque de composés pour compléter la séquence.

3. Saisissez le nom du composé pour l'acide aminé personnalisé ou l'oligonucléotide dans le champ **Compound name**.
4. Saisissez la séquence de l'acide aminé personnalisé ou de l'oligonucléotide dans le champ **Sequence**. La séquence doit inclure au moins un isotope enrichi.
5. Cliquez dans le champ **Chemical formula**.

Le champ **Chemical formula** et la valeur **m/z** sont renseignés avec les informations liées à l'acide aminé personnalisé.

Conseil ! Une icône  s'affiche au-dessus de la séquence. Passez le pointeur de la souris sur cette icône pour voir le symbole (**Symbol**) et la formule du résidu (**Residue Formula**) de l'acide aminé personnalisé utilisé.

6. Cliquez sur **Compound-Specific Parameters > Isotope Pattern**.
Dans le tableau Isotopic Enrichment, la formule du résidu de l'acide aminé personnalisé s'affiche dans la colonne **Element** et **100** s'affiche dans la colonne **Enrichment %**.
7. Modifiez la valeur **Enrichment %**, le cas échéant.
8. Cliquez sur **Save and Close**.

Rechercher les métabolites potentiels

6

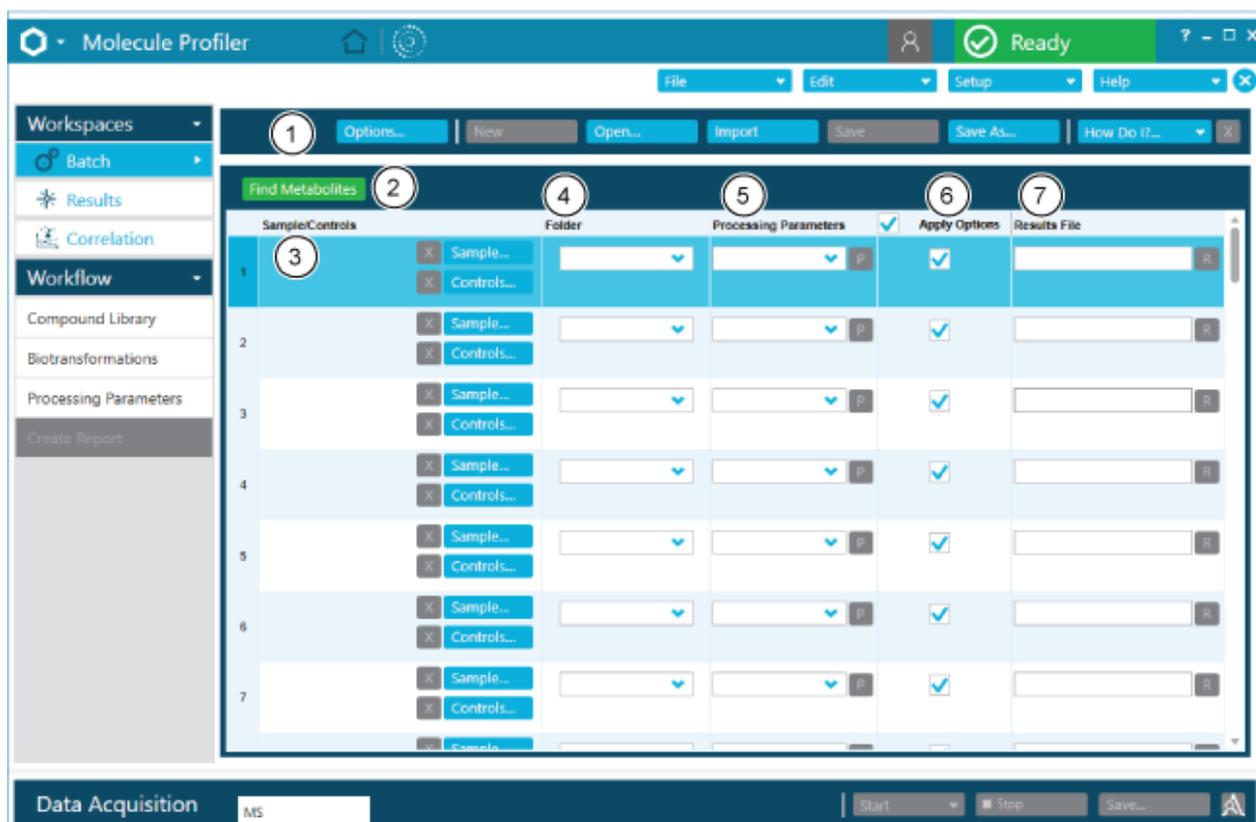
L'espace de travail Batch permet de traiter plusieurs fichiers d'échantillon à la fois. Le tableau du lot peut être complété manuellement ou un lot peut être importé pour renseigner le tableau.

1. Pour préparer un lot manuellement, continuez avec la section [Créer un lot](#).
2. Pour ouvrir un lot, continuez avec la section [Ouvrir un lot](#).
3. Pour importer un lot, continuez avec la section [Importer un lot](#).

À propos de l'espace de travail Batch

Utilisez l'espace de travail Batch pour créer des lots d'échantillon à traiter.

Illustration 6-1 : Espace de travail Batch



Élément	Description
1	<p>Barre de menus. Contient les boutons suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Options : ouvre la boîte de dialogue Batch Processing Options permettant à l'utilisateur de spécifier les options appropriées au lot. Consultez la section Options de traitement par lot. • New : cliquez sur ce bouton pour enregistrer le lot. Disponible uniquement lorsqu'un échantillon a été ajouté dans le champ Sample/Controls. • Open : ouvre la boîte de dialogue Open Processing Batch permettant à l'utilisateur de sélectionner le lot à ouvrir. Consultez la section Ouvrir un lot. • Import : ouvre la boîte de dialogue Batch Importer permettant à l'utilisateur de sélectionner un fichier Excel à importer. Consultez la section Importer un lot. • Save : enregistre le fichier de lot ouvert. Remplace automatiquement la version actuelle. Disponible uniquement lorsque les informations du lot ont été modifiées. • Save As : enregistre le fichier de lot ouvert. Les utilisateurs peuvent attribuer un nouveau nom au fichier de lot.
2	Bouton Find Metabolites . Démarre le traitement du lot.
3	Colonne Sample/Controls . Le bouton Sample ouvre la boîte de dialogue Select Data permettant à l'utilisateur de sélectionner l'échantillon concerné. Le bouton Controls ouvre la boîte de dialogue Select Data permettant à l'utilisateur de sélectionner l'échantillon de contrôle correspondant. Il est possible de sélectionner jusqu'à cinq contrôles par échantillon.
4	Colonne Folder . Fournit une liste de dossiers dans lesquels les paramètres de traitement et les résultats sont stockés.
5	Colonne Processing Parameters . Fournit la liste des paramètres permettant de traiter l'échantillon concerné. Seuls les paramètres de traitement stockés dans le dossier sélectionné dans Folder sont sélectionnables.

Rechercher les métabolites potentiels

Élément	Description
6	<p>Colonne Apply Options. Sélectionnée par défaut. Lorsqu'elle est sélectionnée, applique toutes les options Auto Assign et Report choisies dans la boîte de dialogue Batch Processing Options aux échantillons et aux échantillons de contrôle dans le lot. Les options comprennent :</p> <ul style="list-style-type: none">• Décochez la case Apply Options pour décocher toutes les cases.• Décochez les cases des échantillons concernés.• Cochez les cases des échantillons concernés. <p>Consultez la section Options de traitement par lot.</p> <hr/> <p>Remarque : Les options Auto Assign ne s'appliquent pas au workflow Oligonucléotide.</p> <hr/>
7	Colonne Results File . Nom du fichier de résultats, défini par l'utilisateur.

Spécifier des options de lot

Consultez la section [Options de traitement par lot](#).

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Batch**.
L'espace de travail Batch apparaît.
2. Cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Batch Processing Options apparaît.
3. (Workflows Petite molécule, Peptide et ADC) dans l'onglet Auto Assign :
 - Cochez la case de chaque option concernée.
 - Saisissez la valeur appropriée pour chaque option sélectionnée.
4. Dans l'onglet Report :
 - Cochez la case de chaque option concernée.
 - Saisissez la valeur appropriée pour chaque option sélectionnée.
5. Cliquez sur **OK**.
Les options du lot sont enregistrées avec le lot.

Options de traitement par lot

Option	Description
Auto Assign	
<p>Remarque : Les options Auto Assign sont indépendantes les unes des autres. Elles sont considérées comme des conditions « or ». La ou les options sélectionnées doivent répondre aux critères spécifiés.</p>	
<p>Remarque : Ces options ne s'appliquent pas aux échantillons d'oligonucléotide.</p>	
Assign Structures or Sequences	<p>Propose des structures ou des séquences potentielles pour les métabolites qui répondent aux critères de l'option sélectionnée. Selon le type des données et les paramètres de traitement utilisés (c'est-à-dire s'il s'agit d'une petite molécule ou d'un peptide).</p> <p>Remarque : Il est possible de sélectionner plusieurs options.</p>
Metabolites with peak areas above (%)	Propose des structures ou des séquences potentielles pour les métabolites avec une aire de pic du XIC supérieure à la valeur spécifiée.
Metabolites with analog peak areas above (%)	Propose des structures ou des séquences potentielles pour les métabolites avec une aire de pic analogique supérieure à la valeur spécifiée.
Metabolites with MS/MS quality above	<p>Propose des structures ou des séquences potentielles pour les métabolites dont la qualité MS/MS est supérieure à la valeur spécifiée.</p> <p>Cette option ne concerne que les workflows Oligonucléotide.</p>
Report	
<p>Remarque : Les options de rapport dépendent les unes des autres. Elles sont considérées comme des conditions « et ». Toutes les options sélectionnées doivent répondre aux critères spécifiés.</p>	
Report metabolites with assigned structures or sequences	Affiche une coche dans la colonne Report du tableau Potential Metabolites pour les métabolites ayant une structure ou une séquence associée.
Report metabolites with peak areas above (%)	Affiche une coche dans la colonne Report du tableau Potential Metabolites pour les métabolites dont l'aire de pic est supérieure à la valeur spécifiée.
Report metabolites with analog peak areas above (%)	Affiche une coche dans la colonne Report du tableau Potential Metabolites pour les métabolites dont l'aire de pic analogique est supérieure à la valeur spécifiée.

Rechercher les métabolites potentiels

Option	Description
Report metabolites with scores above (%)	Affiche une coche dans la colonne Report du tableau Potential Metabolites pour les métabolites dont le score est supérieur à la valeur spécifiée.

Créer un lot

Remarque : Un seul échantillon par ligne peut être traité. Il est possible de sélectionner jusqu'à cinq contrôles par échantillon. Cependant, les contrôles ne sont pas requis pour le traitement.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Batch**.
L'espace de travail Batch apparaît.

Conseil ! Sélectionnez l'option **Open** pour récupérer le fichier de lot précédemment enregistré. Consultez la section [Ouvrir un lot](#).

2. Ajoutez un échantillon MS en procédant comme suit :
 - a. Sur la première ligne disponible du tableau du lot, cliquez sur **Sample**.
La boîte de dialogue Select Data apparaît.
 - b. Cliquez sur **Browse**, puis accédez au dossier source approprié.
 - c. Sélectionnez le fichier wiff et l'injection contenant l'échantillon dans le champ **Available**, puis cliquez sur **>>**.
Les informations de l'échantillon s'affichent dans le champ **Selected**.

3. (Facultatif) Ajoutez un échantillon analogique en procédant comme suit :

Conseil ! Si des données analogiques ont été acquises, cochez la case **Use analog data** pour les ajouter automatiquement en même temps que l'échantillon.

- a. Sur la première ligne disponible du tableau du lot, cliquez sur **Use analog data**.
 - b. Ouvrez l'onglet Analog Sample.
 - c. Cliquez sur **Browse**, puis accédez au dossier source approprié.
 - d. Sélectionnez l'échantillon analogique dans le champ **Available**, puis cliquez sur **>>**.
Les informations de l'échantillon s'affichent dans le champ **Selected**.
4. Cliquez sur **OK**.
Le champ **Sample/Controls** de la ligne sélectionnée dans le tableau du lot affiche les informations de l'échantillon.
 5. (Facultatif) Ajoutez un contrôle MS en procédant comme suit :
 - a. Sur la première ligne disponible du tableau du lot, cliquez sur **Control**.
La boîte de dialogue Select Data apparaît.
 - b. Cliquez sur **Browse**, puis accédez au dossier source approprié.

- c. Sélectionnez le fichier wiff et l'injection contenant le contrôle dans le champ **Available**, puis cliquez sur **>>**.
Les informations de l'échantillon s'affichent dans le champ **Selected**.
 - d. Continuez avec l'étape suivante pour ajouter un contrôle analogique ou cliquez sur **OK** pour fermer cette boîte de dialogue.
6. (Facultatif) Ajoutez un contrôle analogique en procédant comme suit :
- a. Sur la première ligne disponible du tableau du lot, cliquez sur **Use analog data**.
 - b. Ouvrez l'onglet Analog Sample.
 - c. Cliquez sur **Browse**, puis accédez au dossier source approprié.
 - d. Sélectionnez l'échantillon analogique dans le champ **Available**, puis cliquez sur **>>**.
Les informations de l'échantillon s'affichent dans le champ **Selected**.
 - e. Cliquez sur **OK**.
Le champ **Sample/Controls** de la ligne sélectionnée dans le tableau du lot affiche les informations de l'échantillon.
7. Dans la colonne **Folder**, sélectionnez le dossier où les paramètres de traitement et les fichiers de résultats seront enregistrés.
8. Dans la colonne **Processing Parameters**, sélectionnez un fichier de paramètres de traitement.

Conseil ! Pour afficher les paramètres de traitement, cliquez sur **P**. Apportez les modifications requises aux paramètres, puis cliquez sur **Save and Close** pour les enregistrer.

9. Dans la colonne **Results File**, saisissez le nom du fichier dans lequel les résultats seront stockés.
10. Répétez les étapes 2 à 9 pour chaque ligne du lot.

Remarque : Le nombre maximum de lignes qu'il est possible de traiter par lot est de 200.

Conseil ! Pour faciliter la création du lot, il est possible de copier-coller ou de supprimer des lignes. Consultez la section [Copier et coller une ligne d'un lot](#) ou [Effacer une ligne de lot](#).

Copier et coller une ligne d'un lot

Utilisez les options de copier-coller pour modifier un lot.

1. Dans le tableau du lot, sélectionnez la ligne à copier.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Copy Batch Row**.
3. Sélectionnez la ligne cible des informations collées.
4. Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Paste Batch Row**.

Rechercher les métabolites potentiels

Remarque : Les informations sont collées à la place de celles de la ligne cible.

Effacer une ligne de lot

Lors de la création d'un lot, il est possible d'effacer des lignes d'information sur un échantillon.

1. Dans le tableau du lot, sélectionnez la ligne à effacer.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez **Clear Batch Row**. Toutes les données sont supprimées de la ligne sélectionnée.

Ouvrir un lot

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Batch**. L'espace de travail Batch apparaît.
2. Cliquez sur **Open**. La boîte de dialogue Open Processing Batch apparaît.
3. Sélectionnez le fichier de lot, puis cliquez sur **OK**.
4. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Si le lot est complet, continuez avec la section [Envoyer un lot](#).
 - S'il est incomplet, continuez avec la section [Créer un lot](#).

Importer un lot

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Batch**.
2. Cliquez sur **Import**. La boîte de dialogue Batch Importer apparaît.
3. Cliquez sur **Browse**. La boîte de dialogue Open excel file apparaît.
4. Accédez au fichier Excel approprié, puis sélectionnez-le.

Remarque : Ce fichier Excel doit être créé à l'aide de l'exemple de modèle (BatchImportTemplate.xlsx) fourni avec le logiciel. Lors de l'installation, ce modèle est placé dans le dossier C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Batch Import Templates.

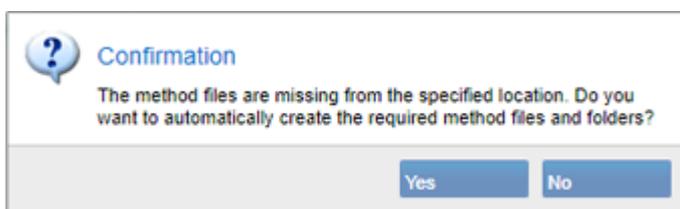
5. Cliquez sur **Open**. Le nom du fichier Excel importé apparaît dans le champ **Target batch file**. Cette information est modifiable.
6. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Pour convertir le fichier Excel sélectionné en un lot Molecule Profiler et ouvrir ce dernier dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Convert and Open** et continuez avec l'étape 7.

- Pour convertir le fichier Excel sélectionné en un lot Molecule Profiler qu'il est possible d'ouvrir ultérieurement dans l'espace de travail Batch, cliquez sur **Convert** et continuez avec l'étape 7.
- Pour annuler l'importation, cliquez sur **Close**.

7. Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Si l'option **Convert and Open** est sélectionnée et que tous les paramètres de traitement (fichiers de méthode) et dossiers référencés dans le fichier Excel sont stockés dans les bons emplacements, continuez avec la section [Envoyer un lot](#).
- Si l'option **Convert** est sélectionnée et que tous les paramètres de traitement (fichiers de méthode) et dossiers référencés dans le fichier Excel sont stockés dans les bons emplacements, continuez avec la section [Enregistrer un lot](#).
- Si l'option **Convert and Open** ou **Convert** est sélectionnée et qu'une boîte de dialogue de confirmation apparaît, continuez avec l'étape 8.

Illustration 6-2 : Boîte de dialogue Confirmation



8. Effectuez l'une des opérations suivantes :

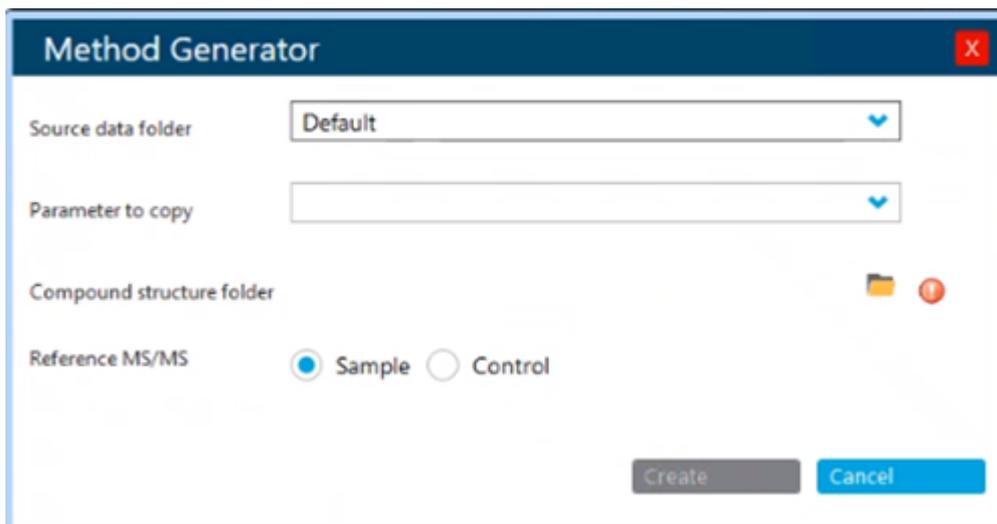
- (Workflow Petite molécule) Pour créer automatiquement les fichiers de méthode requis, continuez avec l'étape 9.

Remarque : Le Method Generator ne peut pas être utilisé avec les workflows Peptide, Oligonucléotide ou ADC.

- Pour créer manuellement les fichiers de méthode requis, cliquez sur **No**, puis annulez l'importation. Continuez avec la section [Créer des méthodes de traitement](#).

9. Cliquez sur **Yes**.

Illustration 6-3 : Boîte de dialogue Method Generator



10. Sélectionnez le dossier approprié dans la liste **Source data folder**.
11. Sélectionnez le fichier de méthode approprié dans la liste **Parameters to copy**.
12. Cliquez sur l'icône de dossier à droite du champ **Compound structure folder**, puis accédez au dossier contenant les structures de précurseur des paramètres de traitement, et sélectionnez-le.
13. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Cliquez sur **Sample** si le fichier wiff de l'échantillon contient le spectre MS/MS de référence.
 - Cliquez sur **Control** si le fichier wiff de contrôle contient le spectre MS/MS de référence.
14. Cliquez sur **Create**.
Les paramètres de traitement et les dossiers manquants sont créés et stockés à l'emplacement spécifié dans le tableur Excel.
15. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Si l'option **Convert and Open** est sélectionnée, continuez avec la section [Envoyer un lot](#).
 - Si l'option **Convert** est sélectionnée, continuez avec la section [Enregistrer un lot](#).

Enregistrer un lot

Il est possible d'enregistrer les informations ajoutées au tableau dans l'espace de travail Batch pour les utiliser ultérieurement.

1. Pour enregistrer un lot sous le même nom, cliquez sur **Save**.
2. Pour enregistrer un lot sous un autre nom, cliquez sur **Save As**.
La boîte de dialogue Save Processing Batch apparaît.

3. Saisissez un nom de fichier unique dans **Name**, puis cliquez sur **OK**.

Envoyer un lot

Lorsqu'il est préparé et que ses options sont spécifiées, le lot est envoyé en traitement.

Remarque : Le cas échéant, les paramètres de traitement d'un échantillon peuvent être modifiés avant d'envoyer le lot.

1. (Facultatif) Pour afficher les paramètres de traitement d'un échantillon, procédez comme suit :
 - a. Sélectionnez la ligne contenant l'échantillon concerné, puis cliquez sur **P** à droite du champ **Processing Parameters**.
Les paramètres de traitement associés à l'échantillon sélectionné s'affichent.
 - b. Apportez les modifications nécessaires, puis cliquez sur **Save and Close**.
L'espace de travail Batch apparaît.
2. Cliquez sur **Save As**.
La boîte de dialogue Save Processing Batch apparaît.
3. Saisissez un nom de fichier unique dans **Name**, puis cliquez sur **OK**.
4. Cliquez sur **Find Metabolites**.
Le traitement du lot commence. Une barre de progression indique l'état d'avancement du traitement. Pendant le traitement, le **P** est désactivé pour éviter la modification des paramètres. Lorsque le traitement de la ligne est terminé, le **P** à droite du champ **Processing Parameters** et le **R** à droite du champ **Results File** sont disponibles.
5. Cliquez sur le **R** pour ouvrir le fichier de résultats dans l'espace de travail Results.

Remarque : Les options Auto Assign et Report sélectionnées dans la boîte de dialogue Batch Processing Options sont configurées par le logiciel.

6. (Facultatif) Effectuez l'étape 1 pour enregistrer les paramètres de traitement modifiés.
7. Cliquez sur **Save**.

Conseil ! Cliquez sur **Save As** pour enregistrer le lot sous un nouveau nom.

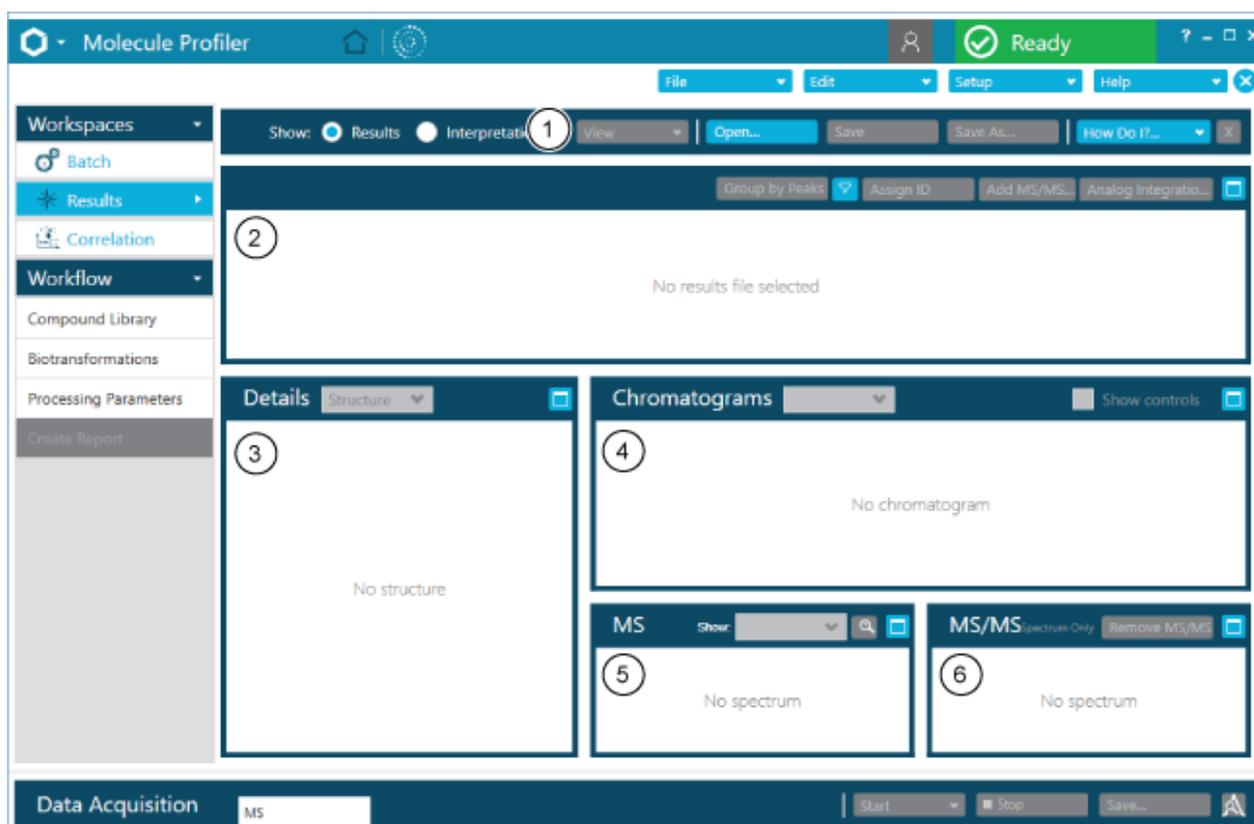
Utilisez l'espace de travail Results pour afficher les résultats de la recherche de métabolites potentiels dans l'échantillon concerné.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.

À propos de l'espace de travail Results

Une fois les données traitées par le logiciel, utilisez l'espace de travail Results pour voir la liste des métabolites potentiels.

Illustration 7-1 : Espace de travail Results



Élément	Description
1	<p>Barre de menus. Contient les boutons suivants :</p> <ul style="list-style-type: none">• View<ul style="list-style-type: none">• Processing Parameters : affiche les paramètres de traitement des résultats.• Batch Options : affiche les options de traitement par lot des résultats.• Sample Details : affiche les informations détaillées de l'échantillon.• Open : ouvre la boîte de dialogue Open Results permettant aux utilisateurs d'accéder aux fichiers de résultats appropriés.• Save : enregistre le fichier de résultats ouvert. Remplace automatiquement la version actuelle.• Save As : enregistre le fichier de résultats ouvert. Les utilisateurs peuvent sélectionner le dossier cible et attribuer un nouveau nom au fichier de résultats.
2	<p>Volet Potential Metabolites. Répertorie tous les pics trouvés par les algorithmes sélectionnés, dans l'échantillon concerné. Consultez la section À propos des stratégies de recherche de pics.</p> <p>Modifiez les résultats en supprimant les lignes ne contenant aucun métabolite potentiel, en modifiant le nom et la formule, en ajoutant des spectres MS/MS et en attribuant des ID de pic. Consultez la section Modifier les résultats.</p> <p>Pour une description des colonnes du tableau Potential Metabolites, consultez la section Tableau 7-1.</p> <hr/> <p>Remarque : Les filtres prédéfinis peuvent affecter les métabolites potentiels affichés dans la liste. Consultez la section À propos des filtres de résultats.</p> <hr/>

Afficher les résultats

Élément	Description
3	<p>Volet Details. Fournit des informations sur le score du métabolite potentiel. Pour chaque propriété de la méthode de traitement, la liste Scoring affiche le score de chaque métabolite, ainsi que le score total de tous les métabolites. Consultez la section Onglet Confirmation Scoring. Les scores sont affichés pour Mass Defect (désactivé pour les oligonucléotides), Isotope Pattern, MS/MS, Mass Accuracy et Total confirmation score.</p> <p>Pour les résultats de petite molécule, la liste Structure affiche la structure disponible.</p> <p>Pour les résultats d'ADC, la liste Structure affiche la structure disponible et la séquence disponible.</p> <p>Pour les résultats de peptide, la liste Sequence affiche la séquence disponible.</p> <p>Pour les résultats d'oligonucléotide, la liste Sequence affiche la séquence d'oligonucléotide du métabolite sélectionné, telle qu'elle est déterminée par l'attribution MS/MS dans l'affichage Interpretation. S'il n'y a aucune attribution, ce champ est vide.</p>

Élément	Description
4	<p>Volet Chromatograms. Permet à l'utilisateur d'afficher différents chromatogrammes pour le métabolite potentiel trouvé :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Metabolites : affiche la somme de tous les pics de métabolite trouvés. Tous les pics chromatographiques majeurs sont affichés, avec leurs temps de rétention et leurs ID. Le pic de métabolite sélectionné et les pics d'élution ayant le même temps de rétention sont en jaune. • XIC : affiche un chromatogramme d'ions extraits (XIC) pour le métabolite sélectionné. Les isotopes sélectionnés pour l'extraction XIC sont libellés en haut du graphique. • Mass Defect : affiche les chromatogrammes de défaut de masse utilisés pour identifier le métabolite sélectionné. Ceci ne concerne que les données de petite molécule. • Isotope Pattern : affiche un chromatogramme de tous les pics avec des modèles isotopiques correspondant au composé parent. • Product Ions : affiche un chromatogramme de tous les pics avec des ions de fragment qui correspondent aux fragments sélectionnés dans l'onglet Product Ion and Neutral Losses. • Neutral Losses : affiche un chromatogramme de tous les pics avec des pertes neutres qui correspondent à celles sélectionnées dans l'onglet Product Ion and Neutral Losses. • Isotope Pattern (données d'acquisition SWATH) : affiche un chromatogramme de tous les pics avec des modèles isotopiques de fragment qui correspondent à ceux sélectionnés dans l'onglet Product Ion and Neutral Losses. • Analog Data : affiche un chromatogramme analogique de tous les pics. Un libellé de pic indique les ID de pic correspondant au pic analogique et à son pic MS. <hr/> <p>Remarque : Les chromatogrammes Mass Defect, Isotope Pattern, Product Ions, Neutral Losses et Isotope Pattern (données d'acquisition SWATH) ne sont disponibles que si ces algorithmes ont été sélectionnés pour le traitement. De plus, si des données analogiques sont traitées conformément à la méthode de traitement, le chromatogramme Analog Data est disponible dans la liste Chromatograms.</p> <hr/> <p>Remarque : Dans les workflows Oligonucléotide, seuls les affichages Metabolites, XIC et Analog Data sont disponibles.</p>

Afficher les résultats

Élément	Description
	<p>Remarque : Si la case Show Controls est cochée, les chromatogrammes XIC et Analog Data, le cas échéant, affichent les traces de contrôle.</p>
5	<p>Volet MS. Affiche le spectre MS. Les options dans la liste Show sélectionnent les pics à mettre en surbrillance :</p> <ul style="list-style-type: none">• Default : affiche une partie de l'échantillon MS, centrée autour de la valeur de m/z du métabolite sélectionné.• Mass Defect : met en surbrillance toutes les valeurs de m/z qui correspondent au filtre de défaut de masse sélectionné dans la méthode de traitement. Ceci ne concerne que les données de petite molécule.• Isotope Pattern : met en surbrillance toutes les valeurs de m/z qui ont le même modèle isotopique que le composé parent. <p>Pour les workflows Oligonucléotide, les traces Predicted Isotope Pattern et Charge Series sont superposées par défaut. L'affichage par défaut montre le spectre TOF MS centré des métabolites sélectionnés. Le pic mono-isotopique est libellé avec la charge prédite et une flèche bleue indique sa position. Les flèches rouges sur l'axe m/z indiquent les isotopes sélectionnés pour l'extraction XIC et la détermination de l'aire. Une enveloppe isotopique théorique se superpose aux pics de centroïde pour offrir une évaluation de la qualité d'adéquation des données observées. Pour régler le spectre sur une plage complète, double-cliquez sous l'axe m/z. Pour voir l'emplacement prédit des états de charge supplémentaires du métabolite sélectionné, effectuez un panoramique et un zoom en cliquant sur le bouton gauche de la souris et en faisant glisser le pointeur sur l'axe m/z.</p>
6	<p>Volet MS/MS. Affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné. La source de ces données est l'une des suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none">• le fichier wiff IDA de l'échantillon ;• le fichier wiff d'acquisition SWATH de l'échantillon ;• le fichier wiff MS/MS dédié, ajouté au fichier de résultats. Consultez la section Ajouter plusieurs spectres à l'aide du bouton Add MS/MS. <p>Pour les oligonucléotides, les pics d'ions produits communs qui correspondaient au spectre MS/MS de référence sélectionné dans les paramètres de traitement sont en jaune. Les pics d'ions produits non correspondants sont en bleu.</p>

Tableau 7-1 : Colonnes du tableau Potential Metabolites

Colonne	Description
Report	Lorsque cette colonne est sélectionnée, inclut le métabolite dans le rapport final.
Peak ID	Affiche l'ID de pic du métabolite. L'ID est basé sur le temps de rétention et la masse du métabolite. Pour tous les métabolites parents, la colonne Peak ID est vide. -# est attribué aux pics ayant la même masse et le même temps de rétention, mais une charge différente. Par exemple : M1-1, M1-2, M1-3, et ainsi de suite.
Name	Affiche le nom du métabolite. Pour les résultats d'ADC, les noms sont précédés du mot <code>Parent</code> . La mention « Parent » indique que les composants médicament (charge utile) et lieu d'une petite molécule sont combinés. Pour les résultats d'oligonucléotide, les principaux noms de composant sont indiqués par les mots <code>Parent</code> et <code>Ion charge</code> . Les produits de biotransformation et de clivage identifiés par la recherche de pics prédits présentent la notation caractéristique 5' ou 3' (n-#). Les résultats de la recherche de pics générique sont indiqués par le préfixe <code>Gain</code> ou <code>Loss</code> .
Formula	Affiche la formule neutre du métabolite.
Assigned	Lorsque cette colonne est sélectionnée, indique que l'information existe dans l'espace de travail Interpretation. Par exemple, une structure ou une séquence peut être présente ou le tableau Fragments peut être renseigné.
Neutral Mass	Affiche la masse neutre du métabolite.
m/z	Affiche la masse mono-isotopique pour calculer le rapport de charge du métabolite. Pour des résultats d'oligonucléotide, si le mono-isotope n'est pas observé, le logiciel calcule sa position et marque la valeur de m/z avec un (n), n indiquant le nombre de pics où le mono-isotope est décalé par rapport au premier pic observé.
Charge	Affiche la charge du métabolite.

Afficher les résultats

Tableau 7-1 : Colonnes du tableau Potential Metabolites (suite)

Colonne	Description
Peak Index	<p>Indique l'isotope de l'aire du pic XIC affiché pour le métabolite.</p> <ul style="list-style-type: none">• Blank cell : mono-isotope• 1 : premier isotope après le pic mono-isotopique• 2 : deuxième isotope après le pic mono-isotopique, et ainsi de suite <p>Si la colonne ne figure pas dans le tableau, l'aide du pic XIC est associée au mono-isotope des métabolites. Pour les métabolites identifiés par la stratégie de recherche de métabolites prédits, un index de pic de base théorique estimé est affiché pour un métabolite. Pour les métabolites identifiés par d'autres stratégies de recherche de pics, le pic isotopique expérimental est affiché. En général, le pic isotopique expérimental est le pic de base. Cependant, pour des données IDA, le pic isotopique expérimental pourrait être l'indice de l'ion précurseur.</p>
ppm	Affiche la précision de masse (en ppm) du métabolite.
R.T. (min)	Affiche le temps de rétention du métabolite.
Peak Area	Affiche l'aire du pic XIC de l'isotope dont l'indice de pic est affiché dans la colonne Peak Index .
% Area	Affiche le % d'aire du XIC, en fonction du nombre total des métabolites dans le tableau.
% Score	Affiche le % du score du métabolite.
Analog - Peak Area	Affiche l'aire du pic analogique. Disponible uniquement lorsque des données analogiques ont été traitées.
Analog - % Area	Affiche le % d'aire du pic analogique. Disponible uniquement lorsque des données analogiques ont été traitées.
Analog - R.T. (min)	Affiche le temps de rétention du pic analogique. Disponible uniquement lorsque des données analogiques ont été traitées.

Afficher uniquement le spectre filtré

Remarque : Cette fonctionnalité ne concerne que les workflows Oligonucléotide.

Si le paramètre **Use advanced MS/MS filter** est sélectionné pour traiter un fichier de données d'acquisition SWATH dans l'onglet MS/MS Parameters du groupe Generic Parameters de l'espace de travail Processing Parameters, cochez cette case pour n'afficher qu'un spectre MS/MS filtré avec le filtre avancé. Décochez cette case pour afficher le spectre avec l'arrière-plan soustrait.

Remarque : Si le paramètre **Use advanced MS/MS filter** est sélectionné mais que seul le spectre avec arrière-plan soustrait s'affiche dans le spectre MS/MS, ceci peut être le résultat de :

- Spectre filtré vide.
- Filtre avancé inefficace à cause d'une interférence due à un pic co-éluant d'une intensité au moins décuplée.
- Filtre avancé inefficace à cause d'un nombre de points de données inférieur à cinq sur le pic du précurseur.

À propos des filtres de résultats

Il est possible d'appliquer des filtres pour affiner les résultats affichés dans le tableau Potential Metabolites.

Conseil ! cliquez sur l'icône de filtrage  pour ouvrir la boîte de dialogue Results Filters.

Tableau 7-2 : Filtres

Sélectionnez ce filtre	Pour afficher ceci
Metabolites	
Top __ metabolites by peak area	Uniquement le nombre spécifié de pics qui sont les plus abondants en fonction du % d'aire.
Reported metabolites	Uniquement les métabolites sélectionnés dans la colonne Report .
Metabolites by adduct	Uniquement les métabolites trouvés par un adduit primaire. L'adduit primaire est le premier adduit visible dans le tableau Advanced Ion Types de l'onglet Generic Parameters > MS Parameters . Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • Primary • Most intense
Assigned Metabolites	
Metabolites with structures or sequences assigned	Seuls les métabolites associés à des structures (petites molécules) ou à des séquences (peptides et oligonucléotides), et repérés par une coche dans la colonne Assigned du tableau Potential Metabolites.
Retention Time Window	
Retention time from __ to __	Uniquement les pics dans la plage spécifiée.
Peak Area	

Afficher les résultats

Tableau 7-2 : Filtres (suite)

Sélectionnez ce filtre	Pour afficher ceci
Peak area from __ % to __ %	Uniquement les pics avec un % d'aire compris dans la plage spécifiée.
Analog peak area from __ % to __ %	Uniquement les pics avec un % d'aire analogique compris dans la plage spécifiée. Si aucun fichier analogique n'a été fourni en vue d'un traitement, ce filtre est sans effet.
Charge	
Charge from __ to __	Uniquement les métabolites avec une valeur de charge comprise dans la plage spécifiée.
Score	
Overall score above __ %	Uniquement les pics avec un score global supérieur à la valeur spécifiée. Consultez la section Onglet Confirmation Scoring . Pour les workflows Oligonucléotide, nous recommandons d'utiliser l'enveloppe isotopique comme seul paramètre dans le calcul du score de confirmation. Nous recommandons également de définir Overall Score au-delà de 20 % pour supprimer les métabolites avec des scores faibles de chevauchement isotopique théorique.
Mass Accuracy	
Accuracy within __ ppm	Uniquement les pics avec une précision de masse comprise dans la plage spécifiée.
Mass Range	
m/z from __ to __	Uniquement les valeurs de <i>m/z</i> comprises dans la plage spécifiée.
Product Ions and Neutral Losses	
MS/MS similarity above __	Uniquement les pics avec un score de similarité MS/MS supérieur à la valeur spécifiée. Si aucun spectre de référence n'est fourni, ce filtre est sans effet.
Minimum number of common product ions __	Uniquement les pics qui ont au moins le nombre spécifié d'ions produits en commun avec le composé parent. Si aucun spectre de référence n'est fourni, ce filtre est sans effet.
Minimum number of common neutral losses __	Uniquement les pics qui ont au moins le nombre spécifié de pertes neutres en commun avec le composé parent. Si aucun spectre de référence n'est fourni, ce filtre est sans effet.

Remarque : La suppression et l'ajout de lignes au tableau mettent automatiquement à jour les paramètres % **Area** et % **Analog Area** de chaque métabolite, ce qui modifie comment les filtres Peak Area, Analog Peak area et Top Metabolites by Peak Area sont appliqués aux lignes restantes.

Modifier les résultats

Il est possible de modifier ou de supprimer les entrées du tableau Potential Metabolites pour affiner les résultats.

Les utilisateurs peuvent :

- [Supprimer des lignes](#)
- [Modifier le nom et la formule d'un métabolite potentiel](#)
- [Attribuer des ID de pic](#)

Supprimer des lignes

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.

Conseil ! Cliquez et appuyez sur **Ctrl** ou **Shift** pour sélectionner plusieurs lignes.

6. Cliquez sur **Edit > Delete Selected Rows..**

Conseil ! Pour annuler la suppression la plus récente, cliquez sur **Edit > Undo Delete**.

7. Cliquez sur **Save**.

Modifier le nom et la formule d'un métabolite potentiel

Consultez la section [Comment le système nomme les métabolites](#).

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.

Afficher les résultats

5. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une ligne du tableau Potential Metabolites et sélectionnez **Edit Name and Formula**.
La boîte de dialogue Edit Name and Formula apparaît.
6. Effectuez l'une des opérations suivantes pour modifier le contenu du champ **Name** :
 - Le cas échéant, sélectionnez un nom dans la liste.
 - Saisissez un nouveau nom.
7. Le cas échéant, sélectionnez un adduit dans la liste.

Remarque : Si l'adduit est modifié, le paramètre **Mass accuracy** du métabolite est automatiquement mis à jour.

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour modifier le contenu du champ **Formula** :
 - Si les informations disponibles sont insuffisantes pour déterminer une formule, sélectionnez **Unknown**.
 - Pour ajouter manuellement une formule au métabolite potentiel, sélectionnez **Use** et saisissez une formule dans le champ proposé.
 - Si le logiciel a proposé des formules potentielles, sélectionnez **Automatic** puis une entrée dans la liste.

Remarque : Si le logiciel n'a proposé aucune formule potentielle, l'option **Automatic** n'est pas sélectionnable.

Remarque : Le logiciel met automatiquement à jour les valeurs dans les champs **Mass accuracy** et **RDB** dès que la nouvelle formule est ajoutée.

9. Pour identifier le métabolite composé parent dans les lignes sélectionnées, cliquez sur **Assign as Parent**.
10. Cliquez sur **OK**.
11. Cliquez sur **Save**.

Remarque : Pour les peptides, les noms sont classés en fonction de la précision de masse du nom proposé et du nombre de manipulations requises, par exemple, le nombre de liaisons rompues. C'est-à-dire que le nom proposé pour le peptide avec une précision de masse plus élevée et nécessitant moins de manipulations apparaît au début de la liste.

Grouper par pics

Utilisez le bouton **Group by Peaks** pour regrouper les pics qui ont la même masse neutre, comme les multiples états de charge d'une molécule, pour afficher un tableau récapitulatif des molécules identifiées, avec **Peak Area**, **%Area**, etc., et le total de tous les états de charge identifiés. Les pics sont regroupés par masse neutre et tolérance du temps de rétention.

Remarque : La fonction de regroupement ne concerne que le workflow Oligonucléotide.

Attribuer des ID de pic

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Examinez les **ID de pic** actuels dans le tableau Potential Metabolites.
6. Effectuez des modifications dans le tableau, notamment en supprimant des lignes et en renommant des métabolites.
7. Cliquez sur **Assign ID**.

Les lignes avec la même formule neutre et le même temps de rétention sont regroupées. Une ligne reçoit l'ID de pic principal et les autres lignes du groupe reçoivent un ID séquentiel, un niveau au-dessous de l'ID de pic principal. Par exemple, si l'ID de pic principal attribué est M2, les autres lignes reçoivent un ID séquentiel commençant par M2. Par exemple, M2-1, M2-2, et ainsi de suite.

Les ID de pic non principaux sont attribués à des pics avec des adduits non principaux. Les adduits non principaux sont ceux qui ont été sélectionnés dans le tableau Advanced Ion Types, mais qui ne s'affichent pas dans la liste Ion Type. Seuls les ID de pic principaux s'affichent dans la liste Ion Type.

Spectres MS/MS

Il est possible d'ajouter, de supprimer ou de remplacer les spectres MS/MS d'un métabolite. Pour ajouter un spectre MS/MS manuellement, copiez un spectre MS/MS centroïdé dans l'espace de travail Explorer, puis collez-le dans l'espace de travail Results. Pour un ajout automatique, cliquez sur le bouton **Add MS/MS** dans l'espace de travail Results.

Ajouter des spectres par collage

Remarque : Cette fonction est en phase bêta.

Remarque : Cette fonction n'est disponible que dans le workflow Oligonucléotide, pour les données TOF-MS/MS et IDA. Le collage de spectres MS/MS depuis IDA Explorer n'est pas pris en charge pour l'instant. Des fichiers de données doivent être ouverts en tant que TIC standard et centroïdés dans l'espace de travail Explorer pour pouvoir être collés dans Molecule Profiler.

Afficher les résultats

Remarque : Le spectre MS/MS existant dans le fichier de résultats n'est pas remplacé tant que le fichier de résultats n'est pas sauvegardé. Pour revenir au spectre d'origine pour le métabolite sélectionné, enregistré dans le fichier Résultats, cliquez sur **Remove MS/MS** avant d'enregistrer le fichier Résultats.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Naviguez jusqu'au fichier approprié, sélectionnez-le, puis cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
4. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
5. Dans la page d'accueil de SCIEX OS, ouvrez l'espace de travail Explorer.
6. Sélectionnez **File > Open Sample**.
La boîte de dialogue Select Sample s'ouvre.
7. Naviguez jusqu'au fichier de données contenant l'échantillon, cliquez sur **+** pour le développer, sélectionnez l'échantillon à ouvrir, puis cliquez sur **OK**.
Ce fichier doit être un fichier wiff ou wiff2, contenant des données TOF-MS/MS ou IDA.
8. S'il contient des données IDA, sélectionnez **As a standard TIC** dans la boîte de dialogue Open IDA Sample, puis cliquez sur **OK**.
9. Ouvrez un spectre MS et MS/MS.

Conseil ! Pour ouvrir le spectre, définissez une fenêtre de sélection ou double-cliquez sur un temps de rétention dans le volet TIC.

10. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre MS/MS, puis sélectionnez **Remove All Traces Except Active**.
11. Sélectionnez **Process > Centroid Spectrum**.
La boîte de dialogue Centroid apparaît.
12. Sélectionnez l'option appropriée selon que vous souhaitez centroïder sur **Intensity**, **Height**, **Area** ou **Intensity sum above 50%**.
13. Sélectionnez **Edit > Copy**.
14. Ouvrez l'espace de travail Molecule Profiler.
15. Cliquez sur **Paste MS/MS**.
Le spectre MS/MS est ajouté.
16. Cliquez sur **Save**.

Ajouter plusieurs spectres à l'aide du bouton Add MS/MS

Remarque : Le spectre MS/MS existant dans le fichier de résultats n'est pas remplacé tant que le fichier de résultats n'est pas sauvegardé. Pour revenir au spectre d'origine pour le métabolite sélectionné, enregistré dans le fichier Résultats, cliquez sur **Remove MS/MS** avant d'enregistrer le fichier Résultats.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Naviguez jusqu'au fichier approprié, sélectionnez-le, puis cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
4. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
5. Cliquez sur **Add MS/MS**.
La boîte de dialogue Add MS/MS apparaît.
6. Cliquez sur **Select MS/MS**.
La boîte de dialogue Select Data apparaît.
7. Accédez au dossier **Source** approprié, puis sélectionnez-le.
8. Cliquez sur **OK**.
9. Dans le volet Available de la boîte de dialogue Select Data, sélectionnez le fichier wiff et l'injection contenant un spectre MS/MS, puis cliquez sur l'icône  pour déplacer le fichier vers le volet Selected.

Conseil ! Vous pouvez sélectionner jusqu'à 10 injections.

10. Lorsque tous les fichiers requis sont affichés dans la boîte de dialogue Add MS/MS, cliquez **OK**.
Le logiciel tente de trouver un spectre correspondant pour chaque métabolite.
11. Examinez le score de chaque métabolite.
Si le spectre MS/MS a été modifié, le logiciel peut recalculer le **% Score**.
12. Cliquez sur **Save**.
Pour modifier certains types de fragment dans un spectre MS/MS, consultez la section [Workflows Oligonucléotide](#).

Supprimer des spectres

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.

Afficher les résultats

4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
6. Cliquez sur **Remove MS/MS** dans le volet MS/MS.

Remarque : S'il existe un spectre IDA pour le métabolite potentiel, il s'affiche dans le volet MS/MS.

7. Cliquez sur **Save**.

Supprimer des fichiers de spectre MS/MS

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Cliquez sur **Add MS/MS**.
6. Sélectionnez le fichier wiff approprié dans le champ **MS/MS Samples**.
7. Cliquez sur **Remove**, puis sur **OK**.
Tous les spectres MS/MS dédiés dans le fichier wiff sont supprimés des résultats.
8. Cliquez sur **Save**.

Caractériser les données MS/MS

8

Après avoir identifié les pics dans un échantillon, utilisez l'interprétation de fragments pour identifier la structure de chaque métabolite potentiel.

À propos de l'affichage Interpretation

L'affichage Interpretation de l'espace de travail Results affiche les données et outils dont vous avez besoin pour identifier une structure potentielle pour chaque métabolite dans un fichier Results.

Affichages Interpretation



Affichage Interpretation de Petite molécule

Illustration 8-1 : Affichage Interpretation de Petite molécule

Interpretation Desotope Prepare... Options... Generate Apply Remove Selected neutral formula: C32H40BrNSO5

TOF MS/MS of 654.2

Assigned: 29 of 30 peaks, score for 29 proposed assignments: 654.5

Fragments: 29 of 127 Proposed Formulae

Use	Mass (m/z)	Ion Formula	Error (mDa)	Intensity (cps)	RDB	Proposed Structures	Sc
<input checked="" type="checkbox"/>	176.0652	C13H8N	0.1	207.3	11.6	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	181.1342	C10H17N2O	0.7	804.1	4.0	1	
<input checked="" type="checkbox"/>	191.0730	C14H9N	0.0	338.0	11.5	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	206.0690	C14H8NO	0.0	1141.1	12.0	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	207.0690	C12H7N4	2.5	2740.1	12.0	0	

Structure Details for C1...
2a Use Broken & Dell

Contained Neutral Losses
2b Use Mass Fi

Composition: C32H40BrNSO5, Mass: 653.2213

4

Parent Structure Structure Candidates

3

No additional proposed structures

Caractériser les données MS/MS

Élément	Élément de l'interface	Description
1	Volet MS/MS	Affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné. L'image miroir du spectre MS/MS de référence s'affiche également, si elle est disponible. Les astérisques identifient les pics sélectionnés en vue d'une attribution. La source de ce spectre est le fichier wiff de l'échantillon IDA, le fichier wiff d'acquisition SWATH de l'échantillon ou un fichier wiff de spectre MS/MS dédié qui a été ajouté au fichier de résultats. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-1 .
2	Tableau Fragments	Répertorie tous les fragments associés du métabolite sélectionné, notamment leur valeur m/z , le nombre de structures proposées et le score. Si une valeur m/z particulière s'est vue attribuer différentes formules, le tableau contient une ligne pour chaque formule. Par défaut, la case Use de la ligne avec le score le plus élevé pour chaque combinaison de formule et de valeur m/z est cochée. Conseil ! Les lignes dont la case Use n'est pas cochée peuvent être masquées. Pour afficher toutes les lignes, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau, puis cliquez sur Show Hidden Rows . Pour une description des fonctionnalités fournies par les icônes, consultez le Tableau 8-3 .
2a	Tableau Structure Details	Répertorie les parties de la structure susceptibles de générer le fragment sélectionné, notamment le nombre de liaisons rompues, la valeur H du delta et le score. La sélection d'une ligne de ce tableau met en surbrillance la partie concernée de la structure. Par défaut, la case Use de la structure de fragment avec le score le plus élevé est cochée.
2b	Tableau Contained Neutral Losses	Contient les pertes neutres des deux masses de fragment.

Élément	Élément de l'interface	Description
3	Volet Structure charts	Contient les deux onglets suivants : <ul style="list-style-type: none"> l'onglet Parent Structure, qui contient la structure parent du métabolite sélectionné ; l'onglet Structure Candidates, un histogramme interactif contenant un tableau qui répertorie toutes les structures proposées, triées par score décroissant. La sélection d'une ligne dans ce tableau modifie la structure affichée dans le volet Structure (élément 2). Pour inclure une structure spécifique dans les résultats, cochez la case Apply to Results correspondante. Consultez la section À propos de l'onglet Structure Candidates.
4	Volet Structure	Permet à l'utilisateur de charger une structure candidate pour les métabolites potentiels et fournit les outils de dessin de base pour la modifier. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-2 .

Tableau 8-1 : Boutons du volet MS/MS

Bouton	Description
Deisotope	Masque tous les isotopes dans le volet MS/MS. Cliquez dessus à nouveau pour réafficher les isotopes.
Prepare	Ouvre la boîte de dialogue Interpret Data permettant aux utilisateurs de modifier les détails nécessaires pour interpréter le métabolite sélectionné (formule, pics actifs, réétalonnage du spectre MS/MS).
Options	Ouvre la boîte de dialogue Options permettant aux utilisateurs d'attribuer des fragments MS/MS. Consultez le Tableau 8-15 dans la section Définir les options .
Generate	Renseigne dans l'onglet Structure Candidate les candidats potentiels générés automatiquement pour le métabolite sélectionné. Consultez la section À propos de l'onglet Structure Candidates .
Apply	Applique les modifications d'interprétation au pic sélectionné.
Remove	Supprime les fragments et la structure de métabolite attribués du pic sélectionné.

Caractériser les données MS/MS

Tableau 8-2 : Boutons du volet Structure

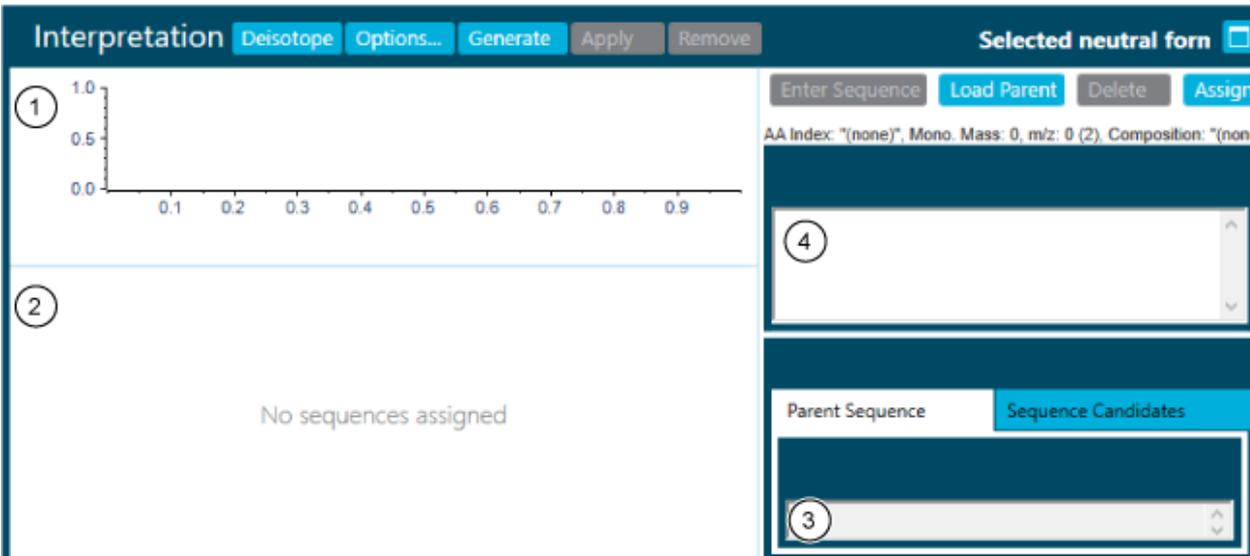
Bouton	Description
Load	<ul style="list-style-type: none">Load Parent : ouvre la structure parent du métabolite sélectionné.Load Structure : ouvre un fichier de structure pour le pic sélectionné.
Delete	Supprime la structure visible du volet Structure.
Save As	Permet à l'utilisateur d'enregistrer la structure sous un autre nom de fichier.
Assign	Calcule les fragments et les pertes neutres de la structure potentielle, puis attribue les ions aux spectres MS/MS.

Tableau 8-3 : Icônes du tableau Fragments

Icône	Description
	Ajoute un libellé au fragment sélectionné.
	Supprime tous les libellés du spectre MS/MS.
	Ouvre la boîte de dialogue Interpretation Filters. Consultez la section À propos des filtres d'interprétation pour les petites molécules .

Affichage Interpretation des peptides

Illustration 8-2 : Affichage Interpretation des peptides



The screenshot displays the 'Interpretation' window of the Molecule Profiler software. The window has a dark blue header with buttons for 'Deisotope', 'Options...', 'Generate', 'Apply', and 'Remove'. On the right side of the header, there is a 'Selected neutral form' checkbox. Below the header, the main area is divided into two sections. The top section, labeled '1', shows a mass spectrum plot with a y-axis from 0.0 to 1.0 and an x-axis from 0.1 to 0.9. The bottom section, labeled '2', contains the text 'No sequences assigned'. On the right side of the window, there is a panel with buttons for 'Enter Sequence', 'Load Parent', 'Delete', and 'Assign'. Below these buttons, there is a text field containing 'AA Index: "(none)", Mono. Mass: 0, m/z: 0 (2), Composition: "(none)". Below this, there is a scrollable list box labeled '4'. At the bottom of the right panel, there are two tabs: 'Parent Sequence' and 'Sequence Candidates'. Below the 'Sequence Candidates' tab, there is another scrollable list box labeled '3'.

Élément	Élément de l'interface	Description
1	Volet MS/MS	Affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné. L'image miroir du spectre MS/MS de référence s'affiche également, si elle est disponible. La source de ce spectre est le fichier wiff de l'échantillon IDA, le fichier wiff d'acquisition SWATH de l'échantillon ou un fichier wiff de spectre MS/MS dédié qui a été ajouté au fichier de résultats. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-4 .
2	Volet Sequence	Permet à l'utilisateur de saisir une séquence. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-5 .
3	Tableau Fragments	Contient une liste de formules proposées pour les métabolites potentiels sélectionnés. Cette liste comprend des valeurs de m/z , des séquences, des types d'ion de fragment (par exemple, y ou b), une charge, des erreurs et des intensités. Pour une description des fonctionnalités fournies par les icônes, consultez le Tableau 8-6 .
4	Volet Sequence charts	Contient les deux onglets suivants : <ul style="list-style-type: none"> l'onglet Parent Sequence, qui contient la séquence du médicament parent ; l'onglet Sequence Candidates, un histogramme interactif qui contient un tableau répertoriant les séquences proposées par le logiciel. Un score, basé sur le pourcentage d'aire du pic associé, est attribué à chaque séquence proposée. Pour appliquer une séquence particulière aux résultats, cochez la case Apply to Results correspondante. La séquence appliquée s'affiche comme la séquence par défaut, une fois le fichier de résultats fermé puis rouvert. Consultez la section À propos de l'onglet Sequence Candidates.

Tableau 8-4 : Boutons du volet MS/MS

Bouton	Description
Deisotope	Supprime tous les isotopes du spectre MS/MS.
Options	Ouvre la boîte de dialogue Options. Consultez le Tableau 8-16 dans la section Définir les options .

Caractériser les données MS/MS

Tableau 8-4 : Boutons du volet MS/MS (suite)

Bouton	Description
Generate	Renseigne dans l'onglet Structure Candidate les candidats potentiels générés automatiquement pour le métabolite sélectionné. Consultez la section À propos de l'onglet Structure Candidates .
Apply	Applique les modifications d'interprétation au pic sélectionné.
Remove	Supprime les fragments et la structure de métabolite attribués du pic sélectionné.

Tableau 8-5 : Boutons du volet Sequence

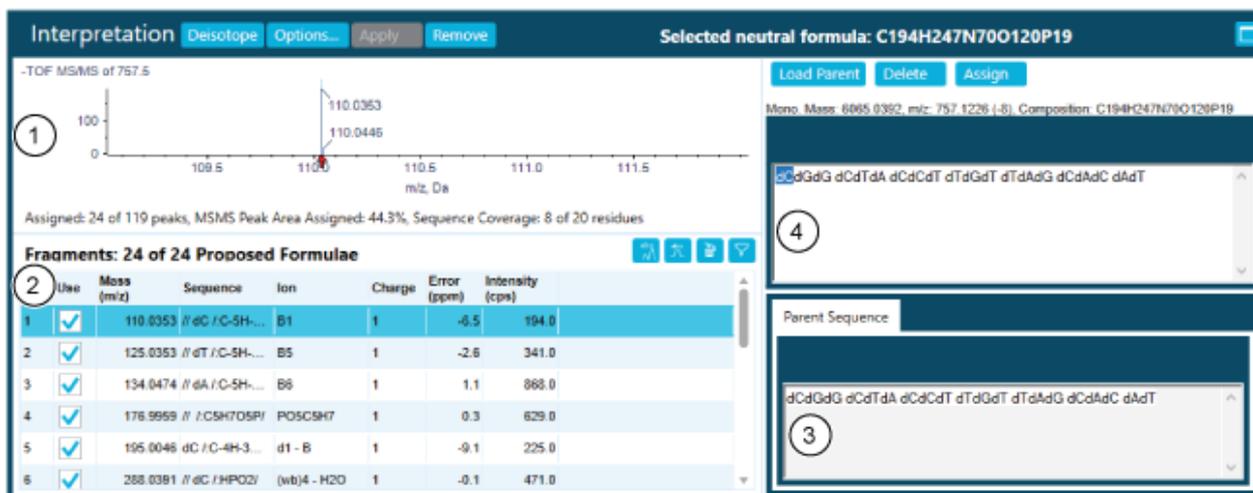
Bouton	Description
Enter Sequence	Permet à l'utilisateur de saisir une nouvelle séquence dans le volet Sequence. Consultez la section Conventions de dénomination des séquences peptidiques .
Load Parent	Ouvre la séquence parent du métabolite sélectionné.
Delete	Supprime la séquence visible du volet Sequence.
Assign	Calcule les fragments et les pertes neutres de la structure potentielle, puis attribue les ions aux spectres MS/MS.

Tableau 8-6 : Icônes du tableau Fragments

Icône	Description
	Ajoute des libellés à tous les pics.
	Ajoute un libellé au fragment sélectionné.
	Supprime tous les libellés du spectre MS/MS.
	Ouvre la boîte de dialogue Interpretation Filters. Consultez la section À propos des fichiers d'interprétation pour les peptides .

Affichage Interpretation des oligonucléotides

Illustration 8-3 : Affichage Interpretation d'oligonucléotide



Élément	Élément de l'interface	Description
1	Volet MS/MS	Affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné. L'image miroir du spectre MS/MS de référence s'affiche également, si elle est disponible. La source de ce spectre est le fichier wiff de l'échantillon IDA, le fichier wiff d'acquisition SWATH de l'échantillon ou un fichier wiff de spectre MS/MS dédié qui a été ajouté au fichier de résultats. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-7 .
2	Tableau Fragments	Contient une liste de formules proposées pour les métabolites potentiels sélectionnés. Cette liste comprend des valeurs de m/z , des séquences, des types d'ion de fragment (par exemple, y ou b), une charge, des erreurs et des intensités. Pour une description des fonctionnalités fournies par les icônes, consultez le Tableau 8-6 .
3	Volet Sequence charts	Contient la séquence du médicament parent.
4	Volet Sequence	Permet à l'utilisateur de saisir une séquence. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-5 .

Caractériser les données MS/MS

Tableau 8-7 : Boutons du volet MS/MS

Bouton	Description
Deisotope	Supprime tous les isotopes du spectre MS/MS.
Options	Ouvre la boîte de dialogue Options. Consultez le Tableau 8-18 dans la section Définir les options .
Apply	Applique les modifications d'interprétation au pic sélectionné.
Remove	Supprime les fragments et la structure de métabolite attribués du pic sélectionné.

Tableau 8-8 : Boutons du volet Sequence

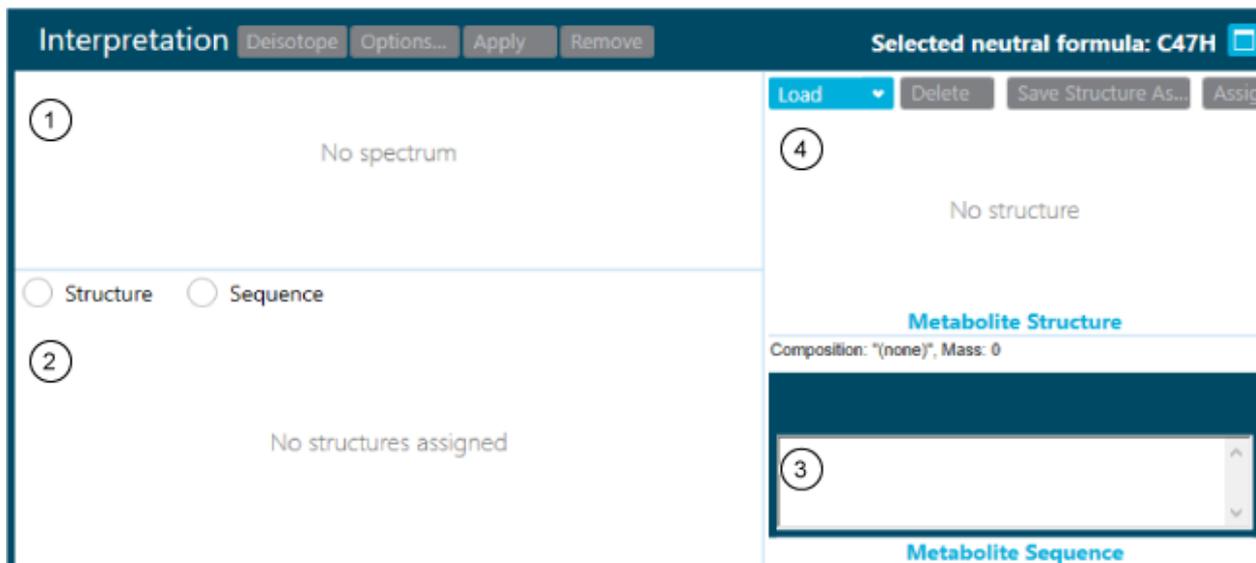
Bouton	Description
Load Parent	Ouvre la séquence parent du métabolite sélectionné.
Delete	Supprime la séquence visible du volet Sequence.
Assign	Calcule les fragments et les pertes neutres de la structure potentielle, puis attribue les ions aux spectres MS/MS.

Tableau 8-9 : Icônes du tableau Fragments

Icône	Description
	Ajoute des libellés à tous les pics.
	Ajoute un libellé au fragment sélectionné.
	Supprime tous les libellés du spectre MS/MS.
	Ouvre la boîte de dialogue Interpretation Filters. Consultez la section À propos des filtres d'interprétation pour les oligonucléotides .

Affichage Interpretation d'ADC

Illustration 8-4 : Affichage Interpretation d'ADC



Élément	Élément de l'interface	Description
1	Volet MS/MS	Affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné. L'image miroir du spectre MS/MS de référence s'affiche également, si elle est disponible. La source de ce spectre est le fichier wiff de l'échantillon IDA, le fichier wiff d'acquisition SWATH de l'échantillon ou un fichier wiff de spectre MS/MS dédié qui a été ajouté au fichier de résultats. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-10 .

Caractériser les données MS/MS

Élément	Élément de l'interface	Description
2	Tableau Fragments	<p>Contient les onglets suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> L'onglet Structure, qui répertorie tous les fragments associés du métabolite sélectionné, notamment leur valeur m/z, le nombre de structures proposées et le score. Si une valeur m/z particulière a pu se voir attribuer différentes formules, le tableau contient une ligne pour chaque formule. Par défaut, la case Use de la ligne avec le score le plus élevé pour chaque combinaison de formule et de valeur m/z est cochée. L'onglet Sequence qui répertorie toutes les formules proposées des métabolites potentiels sélectionnés. Cette liste comprend des valeurs de m/z, des séquences, des types d'ion de fragment (par exemple, y ou b), une charge, des erreurs et des intensités. <p>Pour une description des fonctionnalités fournies par les icônes, consultez le Tableau 8-13.</p>
3	Volet Sequence	<p>Affiche la partie de la séquence qui est conjuguée à la charge utile ou à la fraction du lieu. Pour indiquer le résidu conjugué à la charge utile ou à la fraction du lieu, sélectionnez le résidu, cliquez sur le bouton droit de la souris et sélectionnez Mark Residue to Conjugate.</p>
4	Volet Structure	<p>Permet à l'utilisateur de charger une structure candidate pour les métabolites potentiels et fournit les outils de dessin de base pour modifier la structure. Pour une description des fonctionnalités fournies par les deux boutons, consultez le Tableau 8-11.</p>

Tableau 8-10 : Boutons du volet MS/MS

Bouton	Description
Deisotope	Supprime tous les isotopes du spectre MS/MS.
Options	Ouvre la boîte de dialogue Options. Consultez le Tableau 8-21 dans la section Définir les options .
Apply	Applique les modifications d'interprétation au pic sélectionné.

Tableau 8-10 : Boutons du volet MS/MS (suite)

Bouton	Description
Remove	Supprime les fragments et la structure de métabolite attribués du pic sélectionné.

Tableau 8-11 : Boutons du volet Structure

Bouton	Description
Load	<ul style="list-style-type: none"> • Load Parent Structure : ouvre la structure parent du métabolite sélectionné. • Load Sequence : ouvre la séquence du métabolite sélectionné.
Delete	Supprime la structure chargée du volet Structure, les informations de la séquence chargée du volet Sequence et les informations de la structure et de la séquence associées du tableau Fragments.
Save Structure As	Permet à l'utilisateur d'enregistrer la structure sous un autre nom de fichier.
Assign	Calcule les fragments et les pertes neutres de la structure potentielle, puis attribue les ions aux spectres MS/MS.

Tableau 8-12 : Boutons du tableau Fragments

Bouton	Description
Structure	Répertorie tous les fragments associés du métabolite sélectionné, notamment leur valeur m/z , le nombre de structures proposées et le score. Si une valeur m/z particulière a pu se voir attribuer différentes formules, le tableau contient une ligne pour chaque formule. Par défaut, la case Use de la ligne avec le score le plus élevé pour chaque combinaison de formule et de valeur m/z est cochée.
Sequence	Répertorie toutes les formules proposées pour les métabolites potentiels sélectionnés. Cette liste comprend des valeurs de m/z , des séquences, des types d'ion de fragment (par exemple, y ou b), une charge, des erreurs et des intensités.

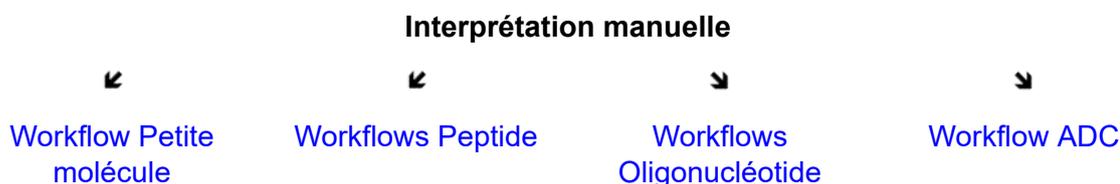
Tableau 8-13 : Icônes du tableau Fragments

Icône	Description
	Ajoute des libellés à tous les pics.
	Ajoute un libellé au fragment sélectionné.
	Supprime tous les libellés du spectre MS/MS.

Tableau 8-13 : Icônes du tableau Fragments (suite)

Icône	Description
	Ouvre la boîte de dialogue Interpretation Filters. Consultez la section À propos des filtres d'interprétation pour ADC .

Interprétation manuelle



Workflow Petite molécule

[Charger une structure](#)

[Modifier une structure](#)

[Préparer l'attribution structurale](#)



[Modifier le nom et la formule d'un métabolite potentiel](#)

[Réétalonner le spectre MS/MS](#)

[Dé-isotoper le spectre MS/MS](#)

[Sélectionner les pics actifs](#)

[Sélectionner les pics de fragment à attribuer](#)

[Définir les options](#)

[Attribuer des structures de fragment](#)



[Attribuer les formules et structures proposées](#)

[Sélectionner une structure de formule pour chaque fragment](#)

[Attacher des structures Markush](#)

[À propos des libellés de pic](#)



[Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS](#)

[À propos des filtres d'interprétation pour les petites molécules](#)

Charger une structure

Avant de démarrer l'identification structurale d'un métabolite, chargez les fichiers de structure qui permettent au logiciel de déterminer les structures de fragment potentielles.

Remarque : Si une structure n'est pas chargée, les formules potentielles peuvent toujours être attribuées à des fragments.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez à un fichier de résultats, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
7. Dans le volet Structure, cliquez sur **Load** puis sélectionnez l'option **Load Structure**.
La boîte de dialogue Open Structure File apparaît.
8. Accédez à un fichier de structure, puis sélectionnez-le.

Remarque : Le logiciel accepte les fichiers de structure au format sdf ou mol.

9. Si des modifications mineures sont requises, modifiez la structure. Consultez la section [Modifier une structure](#).

Modifier une structure

Après avoir chargé une structure pour un métabolite particulier, utilisez les outils d'édition pour lui apporter des modifications mineures.

Conseil ! Utilisez les outils d'édition pour apporter des modifications mineures à une structure, comme différentes positions de fixation pour une transformation métabolique. Ces outils ne doivent pas servir à créer des sous-structures ou à apporter des modifications majeures aux structures.

Tableau 8-14 : Modifier une structure

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Ajouter un atome à une structure	Faites glisser un symbole de la palette vers son nouvel emplacement. L'atome ajouté forme une liaison simple avec l'atome le plus proche.
Créer des atomes sur la palette	<p>Cliquez sur un carré blanc, saisissez le symbole dans la boîte de dialogue Specify Symbol, puis cliquez sur OK.</p> <hr/> <p>Conseil ! Cliquez sur le carré ajouté et saisissez un nouveau symbole pour créer différents atomes.</p> <hr/>
Mettre en surbrillance une partie de la structure	Dessinez un cercle autour des liaisons et des atomes requis.

Caractériser les données MS/MS

Tableau 8-14 : Modifier une structure (suite)

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Déplacer un ou plusieurs atomes	Faites glisser la partie en surbrillance de la structure vers son nouvel emplacement. Si la partie est liée à un autre atome, la liaison se déplace vers le nouvel emplacement. Si la partie est liée à plusieurs atomes, elle est déplacée mais les liaisons restent identiques.
Insérer une structure dans une autre structure	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la structure et cliquez sur l'une des options suivantes : <ul style="list-style-type: none">• Insert .mol File pour ajouter une autre structure.• Insert Conjugate pour ajouter une structure de conjugué.
Supprimer un ou plusieurs atomes	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une partie en surbrillance de la structure, puis cliquez sur Remove Selected Atoms .
Créer une liaison	Sélectionnez deux atomes non liés, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la sélection, cliquez sur New Bond , puis sélectionnez le type de liaison.
Modifier une liaison	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une liaison, cliquez sur Set Bond Type , puis sélectionnez le type de liaison.
Supprimer une liaison	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquez sur Remove Bond .
Modifier l'état de charge d'un atome	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'atome, cliquez sur Atom Charge State , puis sélectionnez l'état.

Conseil ! Pour enregistrer la structure modifiée dans un autre fichier, cliquez sur **Save As**.

Conseil ! Les structures peuvent être enregistrées au format mol ou sdf. Saisissez l'extension appropriée dans la boîte de dialogue Save As.

Préparer l'attribution structurale

Quatre tâches sont à effectuer lorsqu'un utilisateur prépare l'attribution structurale :

- Modifier le nom ou la formule du métabolite potentiel.
- Réétalonner le spectre MS/MS.
- Sélectionner certains pics dans le spectre MS/MS.
- Sélectionner les pics de fragment à interpréter.

Remarque : Si aucune de ces tâches n'est nécessaire, les utilisateurs peuvent ignorer ces procédures et attribuer des structures de fragment immédiatement.

Modifier le nom et la formule d'un métabolite potentiel

Consultez la section [Comment le système nomme les métabolites](#).

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une ligne du tableau Potential Metabolites et sélectionnez **Edit Name and Formula**.
La boîte de dialogue Edit Name and Formula apparaît.
6. Effectuez l'une des opérations suivantes pour modifier le contenu du champ **Name** :
 - Le cas échéant, sélectionnez un nom dans la liste.
 - Saisissez un nouveau nom.
7. Le cas échéant, sélectionnez un adduit dans la liste.

Remarque : Si l'adduit est modifié, le paramètre **Mass accuracy** du métabolite est automatiquement mis à jour.

8. Effectuez l'une des opérations suivantes pour modifier le contenu du champ **Formula** :
 - Si les informations disponibles sont insuffisantes pour déterminer une formule, sélectionnez **Unknown**.
 - Pour ajouter manuellement une formule au métabolite potentiel, sélectionnez **Use** et saisissez une formule dans le champ proposé.
 - Si le logiciel a proposé des formules potentielles, sélectionnez **Automatic** puis une entrée dans la liste.

Remarque : Si le logiciel n'a proposé aucune formule potentielle, l'option **Automatic** n'est pas sélectionnable.

Remarque : Le logiciel met automatiquement à jour les valeurs dans les champs **Mass accuracy** et **RDB** dès que la nouvelle formule est ajoutée.

9. Pour identifier le métabolite composé parent dans les lignes sélectionnées, cliquez sur **Assign as Parent**.
10. Cliquez sur **OK**.
11. Cliquez sur **Save**.

Caractériser les données MS/MS

Remarque : Pour les peptides, les noms sont classés en fonction de la précision de masse du nom proposé et du nombre de manipulations requises, par exemple, le nombre de liaisons rompues. C'est-à-dire que le nom proposé pour le peptide avec une précision de masse plus élevée et nécessitant moins de manipulations apparaît au début de la liste.

Réétalonner le spectre MS/MS

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Prepare**.
La boîte de dialogue Interpret Data apparaît.
2. Cliquez sur l'onglet MS/MS Details.
3. Sélectionnez un fragment à utiliser comme point d'étalonnage.
4. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le fragment sélectionné, puis cliquez sur **Set calibration points**.
Le cercle autour du fragment devient bleu.
5. Répétez les étapes 3 et 4 pour sélectionner plusieurs points d'étalonnage.
6. Pour supprimer les points d'étalonnage définis, sélectionnez les points d'étalonnage appropriés, cliquez sur le bouton droit de la souris et sélectionnez **Clear calibration points**.
Le cercle autour du fragment devient vert.
7. Pour afficher les détails d'un fragment, sélectionnez un point d'étalonnage, cliquez sur le bouton droit de la souris et sélectionnez **Composition details**.
La boîte de dialogue Fragment qui s'affiche indique la valeur m/z , l'erreur de masse en ppm et mDa, une mention indiquant si la formule proposée pointe vers un électron pair, et la valeur RDB (anneaux et liaisons doubles) de la formule proposée.
8. Pour sélectionner un point d'étalonnage comme la composition du fragment ou comme point d'étalonnage potentiel, sélectionnez un point d'étalonnage, cliquez sur le bouton droit de la souris et sélectionnez **Select composition**.
9. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre MS/MS, puis cliquez sur **Recalibrate**.

Remarque : Pour annuler le spectre réétalonné, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquez sur **Revert Calibration**.

Dé-isotoper le spectre MS/MS

Dans l'affichage Interpretation, lorsque l'utilisateur clique sur Deisotope, tous les isotopes sont supprimés du spectre MS/MS. Ceci permet de visualiser rapidement les pics mono-isotopiques, ce qui est très utile lors de l'affichage des données d'acquisition SWATH.

Remarque : Seuls les mono-isotopes s'affichent dans le tableau Results, que cette option soit sélectionnée ou non.

Sélectionner les pics actifs

Les pics actifs sont les seuls pics du spectre MS/MS disponibles pour l'interprétation des fragments.

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Prepare**.
La boîte de dialogue Interpret Data apparaît.
2. Examinez le spectre MS/MS.
Les flèches bleues identifient les pics actifs.
3. Pour sélectionner un pic, dessinez un carré sur le pic.
4. Double-cliquez sur le pic sélectionné.
Une flèche bleue s'affiche sous le pic sélectionné.
5. Pour supprimer des pics individuellement, faites glisser la flèche bleue sous le bord de la boîte de dialogue Interpret Data.
La flèche bleue disparaît sous le pic sélectionné.

Conseil ! Pour effacer tous les pics actifs, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquez sur **Clear All Markers**.

6. Après avoir sélectionné tous les pics actifs, cliquez sur **Find**.
7. Sélectionnez la ligne avec la formule correspondant le mieux aux spectres MS et MS/MS.
8. Cliquez sur **Select**.

Sélectionner les pics de fragment à attribuer

Plusieurs pics peuvent être identifiés comme actifs, mais les utilisateurs peuvent choisir de n'utiliser que ceux dont les intensités sont les plus élevées.

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Dans le champ **Number of fragment peaks selected for assignment**, saisissez le nombre approprié.
3. Cliquez sur **OK**.
Les astérisques dans le spectre MS/MS identifient les pics à attribuer.

Définir les options

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Modifiez les paramètres de fragmentation et de libellé, comme indiqué dans le [Tableau 8-15](#).

Tableau 8-15 : Boîte de dialogue Options

Option	Description
Number of fragment peaks selected for assignment	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre de pics de fragment qui seront attribués. Ce nombre peut représenter une partie des pics sélectionnés dans la boîte de dialogue Prepare. S'il s'agit d'une partie du nombre total de pics, les pics sont choisis par ordre d'intensité.
Minimum signal-to-noise ratio	Utilisez ce champ pour spécifier le seuil servant à attribuer des pics de fragment. Les pics au-dessous de ce seuil ne feront l'objet d'aucune attribution. Le bruit est défini comme le pic de plus faible intensité dans le spectre MS/MS.
MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)	Pour attribuer une formule et éventuellement une structure à un pic de fragment, sa précision de masse doit respecter la tolérance de m/z MS/MS spécifiée.
Fragmentation Settings	
Break aromatic rings	Cochez cette case pour rompre l'anneau aromatique.
Maximum number of bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • 1 • 2 • 3 • 4
Maximum number of C-C bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons C-C à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • 0 • 1 • 2 • 3 • 4
Label Settings	
Label peaks with	Utilisez ce champ pour spécifier les informations à afficher dans les libellés de pic. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • Ion • Ion with ppm Error • Ion with mDa Error

Tableau 8-15 : Boîte de dialogue Options (suite)

Option	Description
Apply options to all potential metabolites	Cochez cette case pour appliquer l'option sélectionnée à tous les métabolites non attribués.

Attribuer des structures de fragment

Pour attribuer des structures, le logiciel lie les pics de fragment dans le spectre MS/MS aux parties potentielles de la structure candidate. Les utilisateurs peuvent alors choisir une formule et la structure qui correspond le mieux à la valeur m/z de chaque fragment. Les astérisques qui identifiaient les pics sélectionnés sont remplacés par une coche si l'attribution a été effectuée ou un x si l'attribution a échoué.

Remarque : Les règles de fragmentation sont intégrées dans le logiciel et ne sont pas modifiables.

Attribuer les formules et structures proposées

Chaque métabolite doit avoir un spectre MS/MS pour que des structures de fragment puissent lui être attribuées. Pour ajouter un spectre, consultez la section [Ajouter plusieurs spectres à l'aide du bouton Add MS/MS](#).

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Chargez une structure candidate, puis modifiez-la. Consultez les sections [Charger une structure](#) et [Modifier une structure](#).
7. Le cas échéant, préparez l'attribution structurelle. Consultez la section [Préparer l'attribution structurelle](#).
8. Dans le volet Structure de la boîte de dialogue Interprétation, cliquez sur **Assign**.
Trois tableaux s'affichent sous le volet MS/MS : le tableau Fragments affichant les fragments identifiés, le tableau Structure Details affichant les structures potentielles et le tableau Contained Neutral Losses affichant les pertes neutres contenues.

Remarque : Si aucune structure n'est chargée, le logiciel n'attribue que des formules potentielles aux fragments.

Caractériser les données MS/MS

Sélectionner une structure de formule pour chaque fragment

1. Le cas échéant, dans l'affichage Interpretation, cliquez avec le bouton droit de la souris sur chacun des tableaux Fragments, Structure Details et Contained Neutral Losses, puis cliquez sur **Show Hidden Rows**.

Remarque : Dans le tableau Fragments, la ligne contenant le score le plus élevé de la valeur de m/z a la case **Use** cochée. Dans le tableau Structure Details, la ligne ayant le score le plus élevé a la case **Use** cochée. Dans le tableau Contained Neutral Losses, toutes les lignes ont la case **Use** cochée.

2. Dans le tableau Fragments, cochez la case **Use** pour identifier la ligne contenant la formule la plus précise pour chaque valeur de m/z .

Conseil ! Dans le tableau Fragments, cochez la case **Use** de plusieurs lignes pour sélectionner plusieurs formules potentielles pour chaque fragment.

3. Dans le tableau Structure Details, cochez la case **Use** pour identifier les parties de la structure qui correspondent le plus à la formule sélectionnée.

4. Dans le tableau Contained Neutral Losses, cochez la case **Use** pour identifier la ligne qui reflète le plus fidèlement les pertes neutres contenues.

Conseil ! Dans les tableaux Structure Details et Contained Neutral Losses, cochez la case **Use** de plusieurs lignes pour un fragment spécifique.

5. Cliquez sur **Apply**.
Les données d'interprétation sont enregistrées dans le métabolite sélectionné.
6. Lorsque toutes les modifications sont effectuées, cliquez sur **Save**.

Conseil ! Pour supprimer toutes les données d'interprétation d'un métabolite particulier, cliquez sur **Remove**.

À propos de l'onglet Structure Candidates

Lorsque vous générez une séquence automatiquement, l'onglet Structure Candidates du volet Structure charts affiche la liste des structures du métabolite sélectionné, qui répondent aux conditions définies dans la boîte de dialogue Options. Consultez la section [Options de traitement par lot](#). Le logiciel génère des structures pour les types suivants de métabolites :

- Métabolites avec un ou deux clivages
- Métabolites à biotransformation simple
- Métabolites avec un clivage et une biotransformation simple

Dans le cas d'un métabolisme plus complexe, l'utilisateur peut fournir ou modifier une structure de métabolite personnalisée et évaluer cette proposition.

La liste des structures (appelée histogramme) contient les colonnes suivantes d'informations :

Colonne	Description
Rank	Indique la position ou le rang des structures.
Relative Evidence	Le rang ou le score est défini par comparaison entre le spectre MS/MS de la structure parente et le spectre MS/MS des métabolites. Les fragments de métabolite sont ensuite comparés à ceux du parent pour identifier les fragments décalés et non décalés. D'autres attributs, comme l'intensité du fragment et l'unicité d'une proposition, sont également pris en compte dans la stratégie de classement globale. Le rang final indique la probabilité de survenance d'une biotransformation ou d'un clivage à un indice d'atome particulier. Cette colonne permet également à l'utilisateur de basculer entre les différentes structures. Consultez la section Basculer entre les structures .
Apply to Results	La case cochée indique que la structure correspondante sera enregistrée dans le fichier de résultats.

Le nombre total de candidats s'affiche en haut du tableau de l'histogramme, juste au-dessus de la colonne **Apply to Results**.

Les structures générées automatiquement ne sont pas modifiables. Les utilisateurs peuvent charger une structure, y apporter les modifications nécessaires et cocher la case **Apply to Results** pour l'inclure dans le fichier de résultats. Consultez les étapes 7 et 8 des sections [Charger une structure](#) et [Modifier une structure](#).

Basculer entre les structures

Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.
La structure correspondante s'affiche dans le volet Structure.

Sélectionner un volet vide

Cliquez sur la première ligne de l'histogramme.
La première ligne de l'histogramme contient les mots `No structure`. Le volet Structure est mis à jour et affiche la mention `No structure`.

Ajouter une structure

Remarque : Une seule structure peut être ajoutée à la liste des structures générées automatiquement. L'ajout d'une structure supplémentaire entraîne le remplacement de la structure précédemment ajoutée.

1. Dans le volet Structure, cliquez sur **Load** puis sélectionnez l'option **Load Structure**. La boîte de dialogue Open Structure File apparaît.
2. Accédez à un fichier mol ou sdf, puis sélectionnez-le.
3. Cliquez sur **Open**.

Caractériser les données MS/MS

La structure sélectionnée s'affiche dans le volet Structure et une ligne est ajoutée au tableau d'histogramme, juste au-dessus de la structure générée automatiquement. La couleur bleue de la ligne de la structure chargée est légèrement différente de celle des lignes contenant les structures générées automatiquement. Le rang défini est 0.

La structure ajoutée par l'utilisateur est modifiable. Toutes les modifications apportées à la structure sont conservées en mémoire lorsque l'utilisateur sort du volet Structure.

Sélectionnez une structure à afficher

1. Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.
La structure correspondante s'affiche dans le volet Structure. Par défaut, seule la première structure de l'histogramme est attribuée au tableau Fragments.
2. Pour attribuer le tableau Fragments à une autre structure, cliquez sur la barre bleue dans l'histogramme et cliquez sur **Assign**.

Supprimer une structure

1. Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.
La structure correspondante s'affiche dans le volet Structure.
2. Dans le volet Structure, cliquez sur **Delete**.
La structure disparaît du volet Structure : la ligne bleue, de l'histogramme ; et le tableau Fragments est supprimé. La structure de la ligne suivante de l'histogramme apparaît dans le volet Structure.

Attacher des structures Markush

Après avoir attribué des structures de fragment, utilisez des structures Markush pour afficher les positions approximatives des modifications chimiques.

Remarque : Il est impossible d'attribuer des structures de fragment à un métabolite qui contient une structure Markush.

1. Mettez en surbrillance une partie de la structure.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris au-dessus ou au-dessous de la structure, puis cliquez sur **Attach Markush**.
3. Sélectionnez **Single Bond** ou **Double Bond**.
4. Dans la boîte de dialogue Select Symbol, saisissez le symbole ou la formule requise.
5. Cliquez sur **OK**.

La structure Markush s'affiche avec une ligne pointillée qui la relie à la partie sélectionnée de la structure.

Remarque : Une fois les données d'interprétation attribuées, la structure peut être modifiée si une structure Markush est attachée. Si la structure Markush est supprimée, toute modification supprimera l'ensemble des données d'interprétation du métabolite.

À propos des libellés de pic

Un pic peut avoir pour libellé :

- une formule ou un type d'ion (pour un peptide),
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de ppm,
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de mDa.

Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Dans le champ **Label peaks with**, sélectionnez le type de libellé.
3. Cliquez sur **OK**.
4. Dans le tableau Fragments, sélectionnez la ligne contenant le pic auquel ajouter un libellé.
5. Cliquez sur .

Conseil ! Pour supprimer tous les libellés du spectre MS/MS, cliquez sur .

À propos des filtres d'interprétation pour les petites molécules

Appliquez des filtres pour affiner les données affichées dans le tableau Fragments. Pour accéder à la boîte de dialogue Interpretation Filters, cliquez sur l'icône  dans le tableau Fragments.

Filtre	Description
Rings and Double Bonds	
RDB	<ul style="list-style-type: none"> • Integer value (even-electron) : n'affiche que les fragments qui ont une valeur entière pour les anneaux et les liaisons doubles. • Non-integer value (odd-electron) : n'affiche que les fragments qui ont une valeur non entière pour les anneaux et les liaisons doubles.
Mass Range	
m/z from ___ to ___	N'affiche que les fragments avec une valeur <i>m/z</i> comprise dans la plage spécifiée.
Mass Accuracy	

Caractériser les données MS/MS

Filtre	Description
Accuracy within	N'affiche que les fragments avec une précision de masse comprise dans la plage spécifiée. <hr/> Remarque : L'unité de mesure de la précision de masse (mDa ou ppm) dépend de l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue Options. <hr/>
Intensity	
Intensity above __ cps	N'affiche que les fragments avec une valeur intensité supérieure à la valeur spécifiée.
Score	
Score above	N'affiche que les fragments avec un score supérieur à la valeur spécifiée.
Structures	
Fragments with assigned structures	N'affiche que les fragments associés à des structures.

Workflows Peptide

[Charger une séquence](#)

[Modifier une séquence](#)

[Définir les options](#)

[Attribuer des séquences de fragment](#)

[À propos des libellés de pic](#)



[Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS](#)

[À propos des fichiers d'interprétation pour les peptides](#)

Charger une séquence

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez à un fichier de résultats, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
7. Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Si le volet Sequence est vide, cliquez sur **Load Parent**.
- Si une séquence existe déjà dans le volet Sequence et qu'une nouvelle séquence doit être ajoutée, cliquez sur **Enter Sequence** pour vider le volet et cliquez sur **Load Parent**.

La séquence mère s'affiche dans le volet Sequence. Le libellé suivant est ajouté au-dessus du volet : **AA Index: [], Mono. Mass: [], m/z: [], Composition: []**, où :

- **AA Index** : (Amino Acid Index) les indices d'acide aminé indiquent la position des premier et dernier résidus de la séquence dans la séquence mère. Si la séquence de catabolites n'est pas un sous-ensemble de la séquence mère, l'indice d'AA ne s'affiche pas.
 - **Mono. Mass** : masse mono-isotopique du composant neutre.
 - **m/z** : valeur du rapport masse/charge. La charge est indiquée entre parenthèses.
 - **Composition** : composition d'élément non chargé de la séquence.
8. Si des modifications sont requises, modifiez la séquence. Consultez la section [Modifier une séquence](#).

Modifier une séquence

Lorsqu'une séquence est créée ou chargée pour un métabolite particulier, elle est modifiable.

1. Cliquez sur la séquence que vous souhaitez modifier.
2. Effectuez les modifications requises. Consultez la section [Conventions de dénomination des séquences peptidiques](#).

Définir les options

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**. La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Modifiez les paramètres de fragmentation et de libellé. Consultez le [Tableau 8-16](#).

Tableau 8-16 : Boîte de dialogue Options

Option	Description
Minimum signal-to-noise ratio	Utilisez ce champ pour spécifier le seuil servant à attribuer des pics de fragment. Les pics au-dessous de ce seuil ne feront l'objet d'aucune attribution. Le bruit est défini comme le pic de plus faible intensité dans le spectre MS/MS.
MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)	Utilisez ce champ pour spécifier la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS. Pour attribuer un type d'ion et une séquence à un pic de fragment, la précision de masse doit respecter la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS spécifiée.
Fragmentation Settings	

Tableau 8-16 : Boîte de dialogue Options (suite)

Option	Description
Fragment Types	Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none">• a• b• y
Maximum number of bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none">• 1• 2• 3 <hr/> Conseil ! Pour des peptides plus complexes, la valeur 3 comme nombre maximum de liaisons à rompre entraîne une augmentation du temps de traitement requis. <hr/>
Break linkages	Si la séquence peptidique contient des liaisons, cochez cette case pour autoriser les liaisons entre chaque acide aminé à rompre.
Label Settings	
Label peaks with	Utilisez ce champ pour spécifier les informations à afficher dans les libellés de pic. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none">• Ion• Ion with ppm Error• Ion with mDa Error• Ion with Charge
Apply options to all potential metabolites	Cochez cette case pour appliquer l'option sélectionnée à tous les métabolites non attribués.

Attribuer des séquences de fragment

Remarque : Les règles de fragmentation sont intégrées dans le logiciel et ne sont pas modifiables.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
 2. Cliquez sur **Open**.
-

La boîte de dialogue Open Results apparaît.

3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Chargez une séquence. Consultez la section [Charger une séquence](#).
7. Dans le volet Sequence, cliquez sur **Assign**.
Le tableau Fragments affiche les résultats d'interprétation de la séquence chargée, à l'aide des options sélectionnées. Consultez la section [Définir les options](#). Des lignes verticales de couleur verte, identifiant les ions correspondants dans le tableau Fragments, sont ajoutées dans le volet MS/MS. Le libellé au-dessus du tableau est mis à jour pour indiquer :
 - **Assigned: x of y peaks**. Indique le nombre de pics qui ont été attribués.
 - **MSMS Peak Area Assigned: x%**. Indique le pourcentage de l'aire de pic MS/MS qui a été attribué.
 - **Sequence Coverage: x of y consecutive amino acids**. Indique le nombre d'acides aminés consécutifs couverts par la séquence.

À propos de l'onglet Sequence Candidates

Lorsque vous générez une séquence automatiquement, l'onglet Sequence Candidates du volet Sequence charts affiche la liste des séquences du catabolite ou du métabolite sélectionné, qui répondent aux conditions définies dans la boîte de dialogue Options. Consultez la section [Options de traitement par lot](#). Le logiciel génère les séquences pour les types suivants de métabolites ou de catabolites :

- Clivages n : jusqu'à quatre modifications sur les clivages
- Parent : où n renvoie au nombre de clivages

La liste des séquences (appelée histogramme) contient les colonnes suivantes d'informations :

Colonne	Description
Rank	Indique le rang relatif de toutes les séquences d'isomère trouvées pour le métabolite spécifié. Le rang est fonction de l'aire de pic MS/MS attribuée.
View sequence fragments	Les pourcentages indiquent le score de la séquence proposée. Cette colonne permet également à l'utilisateur de basculer entre les différentes séquences. Consultez la section Basculer entre des séquences .
AA Index	Indique l'acide aminé au début et à la fin de la séquence.

Caractériser les données MS/MS

Colonne	Description
Apply to Results	La case cochée indique que la séquence correspondante sera enregistrée pour le fichier de résultats.

Le nombre total de candidats s'affiche en haut du tableau de l'histogramme, juste au-dessus de la colonne **Apply to Results**.

Les séquences générées automatiquement ne sont pas modifiables. Les utilisateurs peuvent charger une séquence, y apporter les modifications nécessaires et cocher la case **Apply to Results** pour inclure des séquences dans le fichier de résultats. Consultez l'étape 7 des sections [Charger une séquence](#) et [Modifier une séquence](#).

À propos des libellés de pic

Un pic peut avoir pour libellé :

- une formule ou un type d'ion (pour un peptide),
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de ppm,
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de mDa,
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) avec une charge.

Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Dans le champ **Label peaks with**, sélectionnez le type de libellé.
3. Cliquez sur **OK**.
4. Effectuez l'une des opérations suivantes :

Tableau 8-17 : Ajouter des libellés de pic

Pour ajouter un libellé à un pic	Pour ajouter un libellé à tous les pics
Dans le tableau Fragments, sélectionnez la ligne contenant le pic auquel ajouter un libellé.	Cliquez sur  .
Cliquez sur  .	—

Conseil ! Pour supprimer tous les libellés du spectre MS/MS, cliquez sur .

À propos des fichiers d'interprétation pour les peptides

Appliquez des filtres pour affiner les données affichées dans le tableau Fragments. Pour accéder à la boîte de dialogue Interpretation Filters, cliquez sur l'icône  dans le tableau Fragments.

Filtre	Description
Mass Range	
m/z from __ to __	N'affiche que les fragments avec une valeur <i>m/z</i> comprise dans la plage spécifiée.
Charge Range	
Charge from __ to __	N'affiche que les fragments avec une charge comprise dans la plage sélectionnée. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • From range : 1 à 10 compris • To range : 1 à 10 compris <hr/> Remarque : La valeur haute de la plage doit être supérieure ou égale à la valeur basse.
Ion Type	
Fragment type	Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options disponibles sont les suivants : <ul style="list-style-type: none"> • a • b • y
Mass Accuracy	
Accuracy within	N'affiche que les fragments avec une précision de masse comprise dans la plage spécifiée. <hr/> Remarque : L'unité de mesure de la précision de masse (mDa ou ppm) dépend de l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue Options.
Intensity	
Intensity above __ cps	N'affiche que les fragments avec une valeur intensité supérieure à la valeur spécifiée.

Workflows Oligonucléotide

[Charger une séquence](#)

Caractériser les données MS/MS

[Modifier une séquence](#)

[Définir les options](#)

[Attribuer des séquences de fragment](#)

[À propos des libellés de pic](#)



[Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS](#)

[À propos des filtres d'interprétation pour les oligonucléotides](#)

Charger une séquence

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez à un fichier de résultats, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
7. Si le volet Sequence est vide, effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Cliquez sur **Load Parent**.
 - Saisissez ou collez une séquence dans le volet.

Le libellé suivant est ajouté au-dessus du volet : **Mono. Mass: [], m/z: [], Composition: []**, où :

- **Mono. Mass** : masse mono-isotopique du composant neutre.
 - **m/z** : valeur du rapport masse/charge. La charge est indiquée entre parenthèses.
 - **Composition** : composition d'élément non chargé de la séquence.
8. Si des modifications sont requises, modifiez la séquence. Consultez la section [Modifier une séquence](#).

Modifier une séquence

Lorsqu'une séquence est créée ou chargée pour un métabolite particulier, elle est modifiable.

1. Cliquez sur la séquence que vous souhaitez modifier.
2. Effectuez les modifications requises. Consultez la section [Conventions de dénomination des séquences d'oligonucléotide](#).

Définir les options

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.

2. Modifiez les paramètres de fragmentation et de libellé. Consultez le [Tableau 8-18](#).

Tableau 8-18 : Boîte de dialogue Options

Option	Description
Minimum signal-to-noise ratio	Utilisez ce champ pour spécifier le seuil servant à attribuer des pics de fragment. Les pics au-dessous de ce seuil ne font l'objet d'aucune attribution. Le bruit est défini comme le pic de plus faible intensité dans le spectre MS/MS.
MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)	Utilisez ce champ pour spécifier la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS. Pour attribuer un type d'ion et une séquence à un pic de fragment, la précision de masse doit respecter la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS spécifiée.
Fragmentation Settings	
Fragment Types	<p>Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options comprennent :</p> <ul style="list-style-type: none"> • a • b • c • d • y • Other • wb-H20 • x • y <p>Consultez la section Exemple d'oligonucléotide personnalisé.</p>
Maximum number of bonds to break	<p>Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons à rompre. Les options comprennent :</p> <ul style="list-style-type: none"> • 1 • 2 <p>Une valeur de 2 est recommandée.</p> <hr/> <p>Conseil ! Pour des oligonucléotides plus complexes, la valeur 3 comme nombre maximum de liaisons à rompre entraîne une augmentation du temps de traitement requis.</p> <hr/>
Maximum water and Base losses	Spécifie les pertes en eau maximum pouvant survenir pendant la fragmentation. Une valeur de 1 est recommandée.
Label Settings	

Tableau 8-18 : Boîte de dialogue Options (suite)

Option	Description
Label peaks with	Utilisez ce champ pour spécifier les informations à afficher dans les libellés de pic. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none">• Ion• Ion with ppm Error• Ion with mDa Error• Ion with Charge
Apply options to all potential metabolites	Cochez cette case pour appliquer l'option sélectionnée à tous les métabolites non attribués.

Attribuer des séquences de fragment

Remarque : Les règles de fragmentation sont intégrées dans le logiciel et ne sont pas modifiables.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Chargez une séquence. Consultez la section [Charger une séquence](#).
7. Dans le volet Sequence, cliquez sur **Assign**.
Le tableau Fragments affiche les résultats d'interprétation de la séquence chargée, à l'aide des options sélectionnées. Consultez la section [Définir les options](#). Des lignes verticales de couleur cyan, identifiant les ions correspondants dans le tableau Fragments, sont ajoutées dans le volet MS/MS. Le libellé au-dessus du tableau est mis à jour pour indiquer :
 - **Assigned: x of y peaks**. Indique le nombre de pics qui ont été attribués.
 - **MSMS Peak Area Assigned: x%**. Indique le pourcentage de l'aire de pic MS/MS qui a été attribué.
 - **Sequence Coverage: x of y consecutive nucleotides**. Indique le nombre de nucléotides consécutifs couverts par la séquence.

À propos des libellés de pic

Un pic peut avoir pour libellé :

- une formule ou un type d'ion (pour un oligonucléotide),
- une formule ou un type d'ion (pour un oligonucléotide) et une erreur de ppm,
- une formule ou un type d'ion (pour un oligonucléotide) et une erreur de mDa,
- une formule ou un type d'ion (pour un oligonucléotide) avec une charge.

Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Dans le champ **Label peaks with**, sélectionnez le type de libellé.
3. Cliquez sur **OK**.
4. Effectuez l'une des opérations suivantes :

Tableau 8-19 : Ajouter des libellés de pic

Pour ajouter un libellé à un pic	Pour ajouter un libellé à tous les pics
Dans le tableau Fragments, sélectionnez la ligne contenant le pic auquel ajouter un libellé.	Cliquez sur  .
Cliquez sur  .	—

Conseil ! Pour supprimer tous les libellés du spectre MS/MS, cliquez sur .

À propos des filtres d'interprétation pour les oligonucléotides

Appliquez des filtres pour affiner les données affichées dans le tableau Fragments. Pour accéder à la boîte de dialogue Interpretation Filters, cliquez sur l'icône  dans le tableau Fragments.

Filtre	Description
Mass Range	
m/z from ___ to ___	N'affiche que les fragments avec une valeur <i>m/z</i> comprise dans la plage spécifiée.
Charge Range	
Charge from ___ to ___	N'affiche que les fragments avec une charge supérieure à la valeur sélectionnée. Les valeurs valides sont comprises entre 1 et 10.

Caractériser les données MS/MS

Filtre	Description
Ion Type	
Fragment type	Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options disponibles sont les suivants : <ul style="list-style-type: none">• a• b• c• d• w• wb-H2O• x• y• Other• Base loss• Water loss• Internals
Mass Accuracy	
Accuracy within	N'affiche que les fragments avec une précision de masse comprise dans la plage spécifiée. <hr/> Remarque : L'unité de mesure de la précision de masse (mDa ou ppm) dépend de l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue Options. <hr/>
Intensity	
Intensity above __ cps	N'affiche que les fragments avec une valeur intensité supérieure à la valeur spécifiée.

Workflow ADC

[Charger une structure](#)

[Modifier une structure](#)

[Charger une séquence](#)

[Modifier une séquence](#)

[Définir les options](#)

[Attribuer des ions de fragment à la structure et la séquence](#)

[À propos des libellés de pic](#)



[Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS](#)

[À propos des filtres d'interprétation pour ADC](#)

Charger une structure

Avant de démarrer l'identification structurale d'un métabolite, le chargement d'une structure permet au logiciel de déterminer les structures de fragment potentielles.

Remarque : Si une structure n'est pas chargée, les formules potentielles peuvent toujours être attribuées à des fragments.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez à un fichier de résultats, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
7. Dans le volet Structure, cliquez sur **Load** puis sélectionnez l'option **Load Parent Structure**.
Le volet affiche la structure mère du métabolite sélectionné. Le site marqué de la fixation (dans le fichier des paramètres de traitement intégrés) ou les atomes sont affichés en violet.
8. Si des modifications mineures sont requises, modifiez la structure. Consultez la section [Modifier une structure](#).

Modifier une structure

Après avoir chargé une structure pour un métabolite particulier, utilisez les outils d'édition pour lui apporter des modifications mineures.

Conseil ! Utilisez les outils d'édition pour apporter des modifications mineures à une structure, comme différentes positions de fixation pour une transformation métabolique. Ces outils ne doivent pas servir à créer des sous-structures ou à apporter des modifications majeures aux structures.

Caractériser les données MS/MS

Tableau 8-20 : Modifier une structure

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Ajouter un atome à une structure	Faites glisser un symbole de la palette vers son nouvel emplacement. L'atome ajouté forme une liaison simple avec l'atome le plus proche.
Créer des atomes sur la palette	Cliquez sur un carré blanc, saisissez le symbole dans la boîte de dialogue Specify Symbol, puis cliquez sur OK . Conseil ! Cliquez sur le carré ajouté et saisissez un nouveau symbole pour créer différents atomes.
Mettre en surbrillance une partie de la structure	Dessinez un cercle autour des liaisons et des atomes requis.
Déplacer un ou plusieurs atomes	Faites glisser la partie en surbrillance de la structure vers son nouvel emplacement. Si la partie est liée à un autre atome, la liaison se déplace vers le nouvel emplacement. Si la partie est liée à plusieurs atomes, elle est déplacée mais les liaisons restent identiques.
Insérer une structure dans une autre structure	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la structure et cliquez sur l'une des options suivantes : <ul style="list-style-type: none">• Insert .mol File pour ajouter une autre structure.• Insert Conjugate pour ajouter une structure de conjugué.
Supprimer un ou plusieurs atomes	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une partie en surbrillance de la structure, puis cliquez sur Remove Selected Atoms .
Créer une liaison	Sélectionnez deux atomes non liés, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la sélection, cliquez sur New Bond , puis sélectionnez le type de liaison.
Modifier une liaison	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur une liaison, cliquez sur Set Bond Type , puis sélectionnez le type de liaison.
Supprimer une liaison	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquez sur Remove Bond .
Modifier l'état de charge d'un atome	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'atome, cliquez sur Atom Charge State , puis sélectionnez l'état.

Conseil ! Pour enregistrer la structure modifiée dans un autre fichier, cliquez sur **Save As**.

Conseil ! Les structures peuvent être enregistrées au format mol ou sdf. Saisissez l'extension appropriée dans la boîte de dialogue Save As.

Charger une séquence

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier de résultats d'un peptide, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.
6. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
7. Dans le volet Structure, cliquez sur **Load** puis sélectionnez l'option **Load Sequence**.
Le volet Sequence affiche la séquence mère du métabolite sélectionné.
8. Sélectionnez le résidu devant servir de conjugué, cliquez sur le bouton droit de la souris et sélectionnez **Mark Residue to Conjugate**.
Le résidu sélectionné s'affiche en violet.
9. Si des modifications sont requises, modifiez la séquence. Consultez la section [Modifier une séquence](#).

Modifier une séquence

Lorsqu'une séquence est créée ou chargée pour un métabolite particulier, elle est modifiable.

1. Cliquez sur la séquence que vous souhaitez modifier.
2. Effectuez les modifications requises. Consultez la section [Conventions de dénomination des séquences peptidiques](#).

Définir les options

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Modifiez les paramètres de fragmentation et de libellé, comme indiqué dans le [Tableau 8-21](#).

Tableau 8-21 : Boîte de dialogue Options

Option	Description
Number of fragment peaks selected for structure assignment	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre de pics de fragment qui seront attribués à la partie structurale de l'ADC. S'il s'agit d'une partie du nombre total de pics, les pics sont choisis par ordre d'intensité.

Tableau 8-21 : Boîte de dialogue Options (suite)

Option	Description
Minimum signal-to-noise ratio	Utilisez ce champ pour spécifier le seuil servant à attribuer des pics de fragment. Les pics au-dessous de ce seuil ne feront l'objet d'aucune attribution.
MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)	Utilisez ce champ pour spécifier la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS, en ppm ou mDa. Pour attribuer une formule et éventuellement une structure à un pic de fragment, sa précision de masse doit respecter la tolérance de <i>m/z</i> MS/MS spécifiée.
Structure Fragmentation Settings	
Break aromatic rings	Cochez cette case pour rompre l'anneau aromatique.
Maximum number of bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • 1 • 2 • 3 • 4
Maximum number of C-C bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons C-C à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • 0 • 1 • 2 • 3 • 4
Sequence Fragmentation Settings	
Fragment Types	Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • a • b • y

Tableau 8-21 : Boîte de dialogue Options (suite)

Option	Description
Maximum number of bonds to break	Utilisez ce champ pour spécifier le nombre maximum de liaisons à rompre. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • 1 • 2 • 3 <hr/> Remarque : Pour des peptides plus complexes, la valeur 3 comme nombre maximum de liaisons à rompre entraîne une augmentation du temps de traitement requis.
Break linkages	Si la séquence peptidique contient des liaisons, cochez cette case pour autoriser les liaisons entre chaque acide aminé à rompre.
Label Settings	
Label peaks with	Utilisez ce champ pour spécifier les informations à afficher dans les libellés de pic. Les options comprennent : <ul style="list-style-type: none"> • Ion • Ion with ppm Error • Ion with mDa Error • Ion with Charge
Apply options to all potential metabolites	Cochez cette case pour appliquer l'option sélectionnée à tous les métabolites non attribués.

Attribuer des ions de fragment à la structure et la séquence

Remarque : Les règles de fragmentation sont intégrées dans le logiciel et ne sont pas modifiables.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Dans le champ **Show**, sélectionnez **Interpretation**.

Caractériser les données MS/MS

6. Chargez une structure et une séquence. Consultez les sections [Charger une structure](#) et [Charger une séquence](#).

Remarque : Seule une structure ou une séquence doit être chargée. Cette procédure est basée sur l'hypothèse que les deux ont été chargées.

7. Dans le volet Structure, cliquez sur **Assign**.

Les affichages Structure et Sequence sous les spectres TOF MS/MS sont renseignés, avec l'affichage Structure visible par défaut.

Remarque : Si seule la structure parent a été chargée, l'affichage Structures du tableau Fragments apparaît. Si seule la séquence parent a été chargée, l'affichage Sequences du tableau Fragments apparaît.

Dans l'affichage Structure, le tableau Fragments contient les fragments identifiés, le tableau Structure Details contient les structures potentielles, et le tableau Contained Neutral Losses contient les pertes neutres contenues. Les résultats varient selon les options sélectionnées. Consultez la section [Définir les options](#). Des lignes verticales bleu clair, identifiant les ions correspondants dans le tableau Fragments, sont ajoutées dans le volet MS/MS.

Remarque : Si la structure n'a aucun résultat d'interprétation, la mention `No structures assigned` apparaît dans le tableau Fragments.

Le libellé au-dessus du tableau Fragments indique :

- **Assigned:** *a* of *b* peaks (Structure : *x*, Sequence : *y*), où *a* est la somme de *x* et *y* et indique le nombre de pics attribués, *b* indique le nombre total de pics, *x* indique le nombre de lignes dans l'affichage Structures et *y* indique le nombre de lignes dans l'affichage Sequences.
- **MSMS Peak Area Assigned:** *w*%, où *w* indique le pourcentage d'aire des pics attribués dans les données du spectre.

Le tableau Fragments contient une colonne **Use as Conjugate**. Cette colonne contient une coche pour chaque ligne du tableau. Si la case à cocher est active, un site de fixation est présent sur la structure proposée du fragment. Si la case à cocher est grisée, aucun site de fixation n'est présent. Si la case est cochée, le fragment est utilisé pour la conjugaison avec la séquence. Si la case n'est pas cochée, le fragment n'est pas utilisé. Par défaut, jusqu'à trois fragments contenant un site de fixation sont sélectionnés, en fonction de leur précision et de leur abondance. La première ligne du tableau est sélectionnée par défaut.

8. Vérifiez que l'affichage Structures est sélectionné.
9. Le cas échéant, cliquez avec le bouton droit de la souris sur chacun des tableaux Fragments, Structure Details et Contained Neutral Losses, puis cliquez sur **Show Hidden Rows**.

Remarque : Dans le tableau Fragments, la ligne contenant le score le plus élevé de la valeur de m/z a la case **Use** cochée. Dans le tableau Structure Details, la ligne ayant le score le plus élevé a la case **Use** cochée. Dans le tableau Contained Neutral Losses, toutes les lignes ont la case **Use** cochée.

10. Dans le tableau Fragments, cochez la case **Use** pour identifier la ligne contenant la formule la plus précise pour chaque valeur de m/z .

Conseil ! Cochez la case **Use** de plusieurs lignes pour sélectionner plusieurs formules potentielles pour chaque fragment.

La valeur de m/z attribuée s'affiche en gras et en italique.

11. Dans le tableau Structure Details, cochez la case **Use** pour identifier les parties de la structure qui correspondent le plus à la formule sélectionnée.
12. Dans le tableau Contained Neutral Losses, cochez la case **Use** pour identifier la ligne qui reflète le plus fidèlement les pertes neutres contenues.

Conseil ! Dans les tableaux Structure Details et Contained Neutral Losses, cochez la case **Use** de plusieurs lignes pour un fragment spécifique.

13. Sélectionnez l'affichage Sequences.

Dans l'affichage Sequence, le tableau Fragments affiche les résultats de l'interprétation, en fonction des options sélectionnées (consultez la section [Définir les options](#)), les conjugués sélectionnés dans l'affichage Structures, les éléments sélectionnés dans l'onglet Product Ions and Neutral Losses de la boîte de dialogue Compound-Specific Parameters (consultez la section [Onglet Product Ions and Neutral Losses](#)), et la séquence. Des lignes verticales de couleur verte, identifiant les ions correspondants dans le tableau Fragments, sont ajoutées dans le volet MS/MS.

Remarque : Si la séquence n'a aucun résultat d'interprétation, la mention `No séquences assigned` apparaît dans le tableau Fragments.

Le libellé au-dessus du tableau indique :

- Assigned: a of b peaks (Structure : x, Séquence : y), où a est la somme de x et y et indique le nombre de pics attribués, b indique le nombre total de pics, x indique le nombre de lignes dans l'affichage **Structures** et y indique le nombre de lignes dans l'onglet **Sequences**.
 - **MSMS Peak Area Assigned: w%**, où w indique le pourcentage d'aire des pics attribués dans les données du spectre.
14. Le cas échéant, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau Fragments, puis cliquez sur **Show Hidden Rows**.

Remarque : Dans le tableau Fragments, la ligne contenant le score le plus élevé de la valeur de m/z a la case **Use** cochée.

Caractériser les données MS/MS

15. Dans le tableau Fragments, cochez la case **Use** pour identifier la ligne contenant la formule la plus précise pour chaque valeur de m/z .

Conseil ! Cochez la case **Use** de plusieurs lignes pour sélectionner plusieurs formules potentielles pour chaque fragment.

La valeur de m/z attribuée s'affiche en gras et en italique.

16. Une fois toutes les modifications apportées, cliquez sur **Apply**.
Les données d'interprétation sont enregistrées dans le métabolite sélectionné.
17. Cliquez sur **Save**.

Conseil ! Pour supprimer toutes les données d'interprétation d'un métabolite particulier, cliquez sur **Remove**.

À propos des libellés de pic

Un pic peut avoir pour libellé :

- une formule ou un type d'ion (pour un peptide),
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de ppm,
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) et une erreur de mDa,
- une formule ou un type d'ion (pour un peptide) avec une charge.

Ajouter un libellé de pic au spectre MS/MS

1. Dans l'affichage Interpretation, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Options apparaît.
2. Dans le champ **Label peaks with**, sélectionnez le type de libellé.
3. Cliquez sur **OK**.
4. Effectuez l'une des opérations suivantes :

Tableau 8-22 : Ajouter des libellés de pic

Pour ajouter un libellé à un pic	Pour ajouter un libellé à tous les pics
Dans le tableau Fragments, sélectionnez la ligne contenant le pic auquel ajouter un libellé.	Cliquez sur  .
Cliquez sur  .	—

Conseil ! Pour supprimer tous les libellés du spectre MS/MS, cliquez sur .

À propos des filtres d'interprétation pour ADC

Appliquez des filtres pour affiner les données affichées dans le tableau Fragments. Pour accéder à la boîte de dialogue Interpretation Filters, cliquez sur l'icône  dans le tableau Fragments.

Filtre	Description
Rings and Double Bonds	
RDB	<ul style="list-style-type: none"> • Integer value (even-electron) : n'affiche que les fragments qui ont une valeur entière pour les anneaux et les liaisons doubles. • Non-integer value (odd-electron) : n'affiche que les fragments qui ont une valeur non entière pour les anneaux et les liaisons doubles.
Mass Range	
m/z from ___ to ___	N'affiche que les pics avec une valeur <i>m/z</i> comprise dans la plage spécifiée.
Charge Range	
Charge from ___ to ___	<p>N'affiche que les fragments avec une charge comprise dans la plage sélectionnée. Les options comprennent :</p> <ul style="list-style-type: none"> • From range : 1 à 10 compris • To range : 1 à 10 compris <p>Remarque : La valeur haute de la plage doit être supérieure ou égale à la valeur basse.</p>
Ion Type	
Fragment type	<p>Sélectionnez le type de fragment approprié. Vous pouvez sélectionner plusieurs types. Les options comprennent :</p> <ul style="list-style-type: none"> • a • b • y
Mass Accuracy	
Accuracy within	<p>N'affiche que les fragments avec une précision de masse comprise dans la plage spécifiée.</p> <p>Remarque : L'unité de mesure de la précision de masse (mDa ou ppm) dépend de l'option sélectionnée dans la boîte de dialogue Options.</p>

Caractériser les données MS/MS

Filtre	Description
Intensity	
Intensity above __ cps	N'affiche que les fragments avec une valeur intensité supérieure à la valeur spécifiée.
Score	
Score above	N'affiche que les fragments avec un score supérieur à la valeur spécifiée.
Structures	
Fragments with assigned structures	N'affiche que les fragments associés à des structures.

Interprétation automatique

Interprétation automatique



[Workflow Petite molécule](#)



[Workflows Peptide](#)

Workflow Petite molécule

Pour générer des structures automatiquement, procédez comme suit :

- Dans l'espace de travail Batch, cochez la case **Apply Options** pour appliquer toutes les options Auto-Assign sélectionnées dans la boîte de dialogue Batch Processing Options aux échantillons et aux échantillons de contrôle du lot. Au minimum, l'option Assign Structures or Sequences doit être sélectionnée. Consultez la section [Options de traitement par lot](#).
- Dans l'affichage Interpretation de l'espace de travail Results, cliquez sur **Generate** dans le volet MS/MS.

Workflows Peptide

Pour générer des séquences automatiquement procédez comme suit :

- Dans l'espace de travail Batch, cochez la case **Options** pour appliquer toutes les options **Auto Assign** sélectionnées dans la boîte de dialogue Batch Processing Options aux échantillons et aux échantillons de contrôle du lot. Au minimum, l'option **Assign Structures or Sequences** doit être sélectionnée. Consultez la section [Options de traitement par lot](#).
- Dans l'affichage Interpretation de l'espace de travail Results, cliquez sur **Generate** dans le volet MS/MS.

Basculer entre des séquences

Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.

La séquence correspondante apparaît dans le volet Sequence et le tableau Fragments affiche les informations concernant la séquence sélectionnée. Le libellé au-dessus du volet Sequence est mis à jour et indique le numéro de la séquence ainsi que son rang. Par exemple, « Sequence x of y, rank = z ».

Sélectionner un volet vide

Cliquez sur la première ligne de l'histogramme.

La première ligne de l'histogramme contient les mots `No sequence`. Le volet Sequence est vidé, puis le tableau Fragments est mis à jour et affiche `No sequences assigned`.

Ajouter une séquence

Remarque : Une seule séquence peut être ajoutée à la liste des séquences générées automatiquement. L'ajout d'une séquence supplémentaire remplace la séquence précédemment ajoutée.

1. Dans le volet Sequence, cliquez sur **Enter Sequence**.
Le volet Sequence est vidé, puis le tableau Fragments est mis à jour et affiche les mots `No sequence assigned`.
2. Cliquez sur **Load Parent**.
La séquence mère s'affiche dans le volet Sequence et dans l'onglet **Parent Sequence** du volet Sequence charts.
3. Appuyez sur **Tab** pour valider la séquence mère.

Un trait de soulignement est ajouté à la séquence pour indiquer qu'elle est valide. L'histogramme créé dans l'onglet Sequence Candidates affiche la séquence ajoutée par l'utilisateur sur la ligne située juste au-dessus de la première séquence générée automatiquement. Le rang de la séquence ajoutée par l'utilisateur sera 0. La barre bleue s'étend sur toute la largeur du tableau. Cependant, le pourcentage ne s'affichera pas sur la barre. La couleur bleue de la ligne de la séquence chargée est légèrement différente de celle des lignes contenant les séquences générées automatiquement. Le nombre de séquences proposées sera augmenté de 1.

La séquence ajoutée par l'utilisateur est modifiable. Toutes les modifications apportées à la séquence seront conservées en mémoire lorsque l'utilisateur sort du volet Sequence.

Sélectionner une séquence à afficher

Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.

La séquence correspondante s'affiche dans le volet Sequence. Le tableau Fragments est mis à jour et affiche les informations de la séquence sélectionnée. Le libellé au-dessus du volet Sequence est mis à jour et indique le numéro de la séquence ainsi que son rang. Par exemple, « Sequence x of y, rank = z ».

Supprimer une séquence

1. Cliquez sur une barre bleue dans l'histogramme.
La séquence correspondante s'affiche dans le volet Sequence.
2. Dans le volet Sequence, cliquez sur **Delete**.
La séquence est supprimée du volet Sequence et la ligne, de l'histogramme. La séquence de la ligne suivante dans l'histogramme apparaît dans le volet Sequence et le tableau Fragments affiche les informations concernant la séquence sélectionnée.

Lorsque des métabolites potentiels sont trouvés dans plusieurs échantillons, les résultats de chaque échantillon sont comparables. Cela permet à l'utilisateur de visualiser les différences et les similarités entre les métabolites potentiels générés par plusieurs fichiers de résultats. Les métabolites de différents fichiers de résultats sont considérés comme identiques s'ils correspondent aux tolérances de rapport masse/charge et de temps de rétention définies dans la boîte de dialogue Correlate Results.

Pour les workflows Oligonucléotide, le logiciel peut regrouper plusieurs métabolites à charges multiples, ayant la même masse neutre et respectant la tolérance du temps de rétention, dans une seule entrée de l'espace de travail Correlation. Cette fonctionnalité est appelée Regroupement. Pour l'activer, sélectionnez **Group results by analyte** lors de la corrélation des résultats. Lorsque cette fonctionnalité est activée, les espèces à charges multiples sont fusionnées, ce qui facilite la comparaison entre les fichiers de résultats.

Remarque : Activez cette fonctionnalité avant de corréler les fichiers de résultats.

Préparer la corrélation

1. Cliquez sur **File > New > Correlation**.
La boîte de dialogue Correlate Results apparaît.
2. Cliquez sur **Add Results**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez aux fichiers appropriés, puis sélectionnez-les.

Remarque : Les fichiers sélectionnés peuvent contenir différents composés. Les données analogiques ne sont pas requises pour la corrélation.

4. Renseignez les champs **X-axis title** et **X-axis units**.
Cette opération attribue un libellé à l'axe des abscisses des graphiques dans l'espace de travail Correlation.
5. Saisissez une valeur unique en regard de chaque fichier de résultats dans le champ correspondant au libellé de l'axe des abscisses. Par exemple, si le libellé attribué à l'étape 4 est **Time**, indiquez l'heure de chaque fichier de résultats dans le champ **Time**.
6. Sélectionnez **Include RRF in % area determination**, le cas échéant.

Remarque : Ne sélectionnez pas **Include RRF in % area determination** et **Group results by analyte** en même temps..

Si cette option est sélectionnée, l'aire MS sera multipliée par le facteur de réponse relatif ([Facteur de réponse relatif](#)). L'aire modifiée apparaît dans les affichages Linear Graph, Bar Graph et Table du volet Correlations Details. La modification ne s'affiche pas dans le tableau Potential Metabolites.

Corréler les résultats

7. (Workflow Oligonucléotide) Le cas échéant, sélectionnez **Group results by analyte** pour regrouper les pics en fonction de leur masse neutre.
8. Personnalisez la corrélation. Consultez la section [Personnaliser la corrélation](#).
9. Dans le champ **Correlation file name**, saisissez le nom du fichier.

Remarque : N'incluez pas d'espaces dans le nom du fichier.

10. Pour choisir l'emplacement où enregistrer le fichier de corrélation, cliquez sur **Browse** puis sélectionnez le dossier approprié.
11. Cliquez sur **OK**.
Le logiciel compare les métabolites trouvés dans les fichiers sélectionnés et affiche les résultats dans l'espace de travail Correlation.

Conseil ! La même corrélation peut s'effectuer avec différents paramètres. Dans l'espace de travail Correlation, cliquez sur **Correlate Results**.

Personnaliser la corrélation

Sélectionnez les fichiers à corréler, puis modifiez les valeurs des paramètres dans la boîte de dialogue Correlation Results pour améliorer les résultats.

Améliorer l'alignement des pics

Le temps de rétention de chaque fichier de résultats peut être décalé pour mieux corréler les fichiers sélectionnés.

1. Avant de corréler les résultats, procédez comme suit :
 - a. Ouvrez chacun des fichiers de résultats appropriés dans l'espace de travail Results.
 - b. Examinez le temps de rétention d'un métabolite particulier figurant dans tous les fichiers.
2. Selon le décalage indiqué dans le fichier de résultats, dans la boîte de dialogue Correlate Results, saisissez une valeur dans le champ **R.T. Shift (min)** en regard du fichier concerné.

Remarque : Le champ **R.T. Shift (min)** accepte les valeurs comprises entre -2,00 et 2,00 minutes.

Définir la fusion des pics

Certaines tolérances permettent aux pics avec des valeurs similaires d'être considérés comme le même pic.

1. Ouvrez chacun des fichiers de résultats dans l'espace de travail Results.
2. Identifiez le temps de rétention et la tolérance de masse d'un métabolite particulier figurant dans tous les fichiers.

3. Dans la boîte de dialogue Correlate Results, dans le groupe Tolerances, saisissez une valeur dans le champ **Retention time**.

Remarque : Le champ **Retention time** accepte les valeurs comprises entre 0,01 et 2,00 minutes.

4. Saisissez une valeur dans le champ **MS m/z**, puis sélectionnez **ppm** ou **mDa** comme unité de mesure.

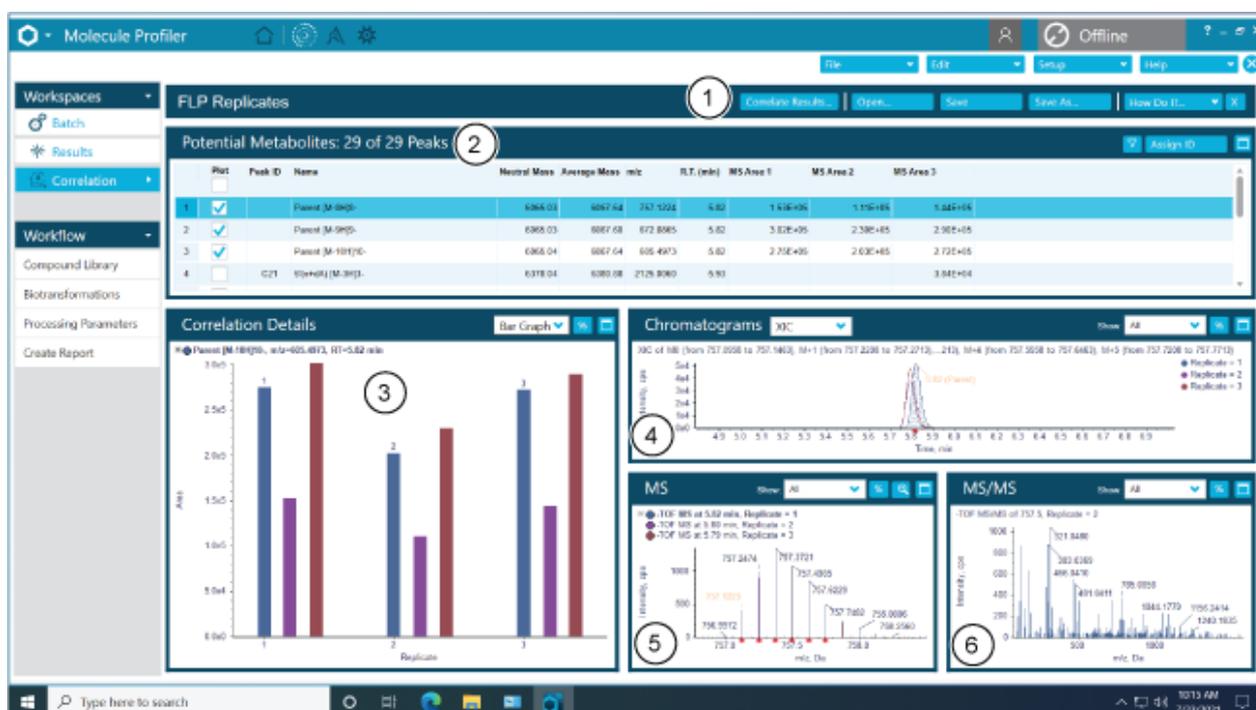
Remarque : Dans les workflows Oligonucléotide, si l'option **Group results by analyte** est sélectionnée, seule l'unité **ppm** est disponible.

Remarque : Le champ **MS m/z** accepte les valeurs comprises entre 0,1 et 250,0.

À propos de l'espace de travail Correlation

L'espace de travail Correlation affiche la comparaison des métabolites potentiels trouvés dans les fichiers de résultats sélectionnés.

Illustration 9-1 : Espace de travail Correlation



Corréler les résultats

Élément	Description
1	<p>Barre de menus. La barre de menus contient les boutons suivants :</p> <ul style="list-style-type: none">• Correlate Results : ouvre la boîte de dialogue Correlate Results. Consultez la section Préparer la corrélation.• Open : ouvre la boîte de dialogue Open Correlation permettant aux utilisateurs d'accéder aux fichiers de corrélation appropriés.• Save : enregistre le fichier de corrélation ouvert. Remplace automatiquement la version actuelle.• Save As : enregistre le fichier de corrélation ouvert. Éventuellement, sélectionnez le dossier cible et attribuez un nouveau nom au fichier de corrélation.
2	<p>Volet Potential Metabolites. Répertorie tous les pics de corrélation en fonction des tolérances définies. Chaque ligne indique un métabolite potentiel corrélé, le MS Area et le Analog Area, le cas échéant, des fichiers de résultats. Une cellule MS Area vide signale que le métabolite n'a pas été trouvé dans le fichier de résultats concerné. Une cellule Analog Area vide signale soit que le métabolite n'a pas été trouvé dans le fichier de résultats, soit que la réponse analogique était nulle (zéro).</p> <p>Ce volet contient les boutons suivants :</p> <ul style="list-style-type: none">• Select values to filter peaks from the results. () : ouvre la boîte de dialogue Correlation Filters permettant aux utilisateurs de définir les valeurs qui vont filtrer les informations ne répondant pas aux critères dans les résultats. Consultez la section À propos des filtres de corrélation.• Assign ID : attribue un identifiant unique à chaque pic dans le tableau Potential Metabolites, en fonction du temps de rétention et de la valeur de <i>m/z</i>.

Élément	Description
3	<p>Volet Correlation Details . Permet aux utilisateurs de comparer les métabolites corrélés. Consultez la section Comparer des métabolites corrélés. Il est possible de sélectionner différents métabolites et fichiers de résultats. Les données MS et analogiques peuvent être présentées dans les formats suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Linear Graph ou Bar Graph : compare l'intensité de chaque métabolite dans chacun des fichiers de résultats dans lesquels il a été trouvé. • Table : identifie les fichiers de résultats dans lesquels chaque métabolite a été trouvé. Les utilisateurs peuvent également choisir d'afficher l'occurrence, l'ID de pic ou l'aire de pic dans le tableau. <hr/> <p>Remarque : Si un facteur de réponse relatif a été appliqué lors de la préparation de la corrélation, les données MS qualitatives s'affichent dans les graphiques linéaires et les graphiques à barres.</p>
4	Volet Chromatograms : affiche un chromatogramme d'ions extraits (XIC) ou un chromatogramme analogique pour le métabolite sélectionné. Les chromatogrammes peuvent inclure des données d'un ou de l'ensemble des fichiers de résultats contenant le métabolite.
5	Volet MS : affiche le spectre MS de l'échantillon concerné, provenant d'un ou de l'ensemble des fichiers de résultats contenant le métabolite sélectionné.
6	Volet MS/MS : affiche le spectre MS/MS du métabolite sélectionné, provenant d'un ou de l'ensemble des fichiers de résultats contenant ce métabolite.

Remarque : Si les résultats de corrélation sont groupés, les spectres chromatographiques, MS et MS/MS ne s'affichent pas.

Modifier le nom d'un métabolite corrélé

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Correlation**.
L'espace de travail Correlation apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Correlation apparaît.
3. Accédez au fichier de corrélation approprié, puis sélectionnez-le.
4. Sélectionnez une ligne dans le tableau Potential Metabolites.
5. Cliquez sur **Edit > Edit Name**.
La boîte de dialogue Edit Name apparaît.

Corréler les résultats

6. Saisissez un nouveau nom de métabolite.
7. Cliquez sur **OK**.
Le nom du métabolite est modifié.

Comparer des métabolites corrélés

Après avoir corrélé les métabolites contenus dans plusieurs fichiers de résultats, les utilisateurs peuvent comparer les métabolites sélectionnés plus en détail.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Correlation**.
L'espace de travail Correlation apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Correlation apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Dans le tableau Potential Metabolites, cochez la case **Plot** en regard des métabolites potentiels à comparer.
Les métabolites s'affichent dans le volet Correlation Details.
5. Pour modifier le facteur de réponse relatif (RRF) d'un métabolite, saisissez une valeur dans le champ **RRF**.

Dans le graphique linéaire ou à barres, l'aire MS et l'aire analogique, le cas échéant, sont multipliées par la valeur du facteur RRF.

Remarque : Ce champ ne s'affiche que si un facteur de réponse relatif a été utilisé lors de la préparation de la corrélation.

6. Pour afficher les données analogiques dans le volet Correlation Details, cliquez sur **Analog data**.
7. Pour identifier les fichiers qui contiennent les métabolites sélectionnés, sélectionnez **Table** dans le volet Correlation Details.
8. Pour afficher les données normalisées, cliquez sur .

Conseil ! Les données normalisées peuvent s'afficher dans le graphique linéaire, le graphique à barres, le XIC, le chromatogramme analogique, le spectre MS et le spectre MS/MS.

9. Pour réattribuer les ID de pic des métabolites potentiels dans les fichiers corrélés, selon le temps de rétention et la valeur de m/z , cliquez sur **Assign ID**.

À propos des filtres de corrélation

Appliquez des filtres pour affiner les données affichées dans le tableau de corrélation.

Cliquez sur l'icône  pour accéder à la boîte de dialogue Correlation Filters ou cliquez sur **Setup > Filters > Correlation**.

Filtre	Description
Mass Range	
m/z from __ to __	N'affiche que les pics avec une valeur <i>m/z</i> comprise dans la plage spécifiée.
Retention Time	
R.T. from __ to __	N'affiche que les pics avec un temps de rétention compris dans la plage spécifiée.
Occurrence	
Peaks in __ or more results files	<p>N'affiche que les pics figurant dans le nombre spécifié de fichiers de résultats.</p> <hr/> <p>Remarque : La valeur maximale dépend du nombre de fichiers sélectionnés en vue de la corrélation. Par exemple, si cinq fichiers de résultats sont sélectionnés en vue de la corrélation, le nombre maximum d'occurrences d'un pic pouvant être sélectionnées est de cinq.</p> <hr/>

Pour générer des rapports à l'aide du logiciel, Microsoft Word 2010 ou une version ultérieure doit être installé sur l'ordinateur.

Les utilisateurs peuvent créer des rapports aux formats Adobe PDF, Microsoft Word et HTML. Il est également possible d'envoyer un rapport à une imprimante.

Les modèles de rapport suivants sont installés avec le logiciel dans le dossier C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Report Templates :

- Dossier Correlation
 - Rapport détaillé de corrélation
 - Rapport résumé de corrélation
 - Rapport de groupe de corrélation
- Dossier ResultsAndInterpret
 - Rapport détaillé d'interprétation
 - Rapport résumé d'interprétation
 - Rapport détaillé des résultats
 - Rapport résumé des résultats
- Dossier ResultsAndInterpret_ADC
 - Rapport détaillé d'interprétation
 - Rapport résumé d'interprétation
 - Rapport détaillé des résultats
 - Rapport résumé des résultats
- Dossier ResultsAndInterpret_Peptides
 - Rapport détaillé d'interprétation
 - Rapport résumé d'interprétation
 - Rapport détaillé des résultats
 - Rapport résumé des résultats
- Dossier ResultsAndInterpret_Oligo
 - Rapport détaillé d'interprétation
 - Rapport résumé d'interprétation
 - Rapport détaillé des résultats
 - Rapport résumé des résultats

Même s'il peut contenir de nombreux éléments d'information, un rapport n'affiche que le contenu du fichier de résultats à l'heure où il est généré. Si le fichier de résultats ne contient pas une information particulière, comme l'enrichissement isotopique, le rapport généré ne la mentionnera pas et, dans la plupart des cas, contiendra un libellé de champ ou un en-tête correspondant à cette information. Le contenu du rapport correspond aux filtres qui ont été appliqués au tableau Potential Metabolites ou Fragments. Par exemple, si le tableau Potential Metabolites est filtré pour n'afficher que les 5 principaux pics sur 23, seuls ces 5 pics sont inclus dans le rapport.

Tous les graphiques ou spectres inclus dans le rapport sont affichés au niveau de zoom par défaut, quel que soit le niveau de zoom sélectionné dans l'interface utilisateur. Tous les graphiques de corrélation sont inclus avec des données non normalisées.

Remarque : Lors de la création de modèles de rapport de corrélation personnalisés, veuillez à inclure la mention « grouped » dans le nom du fichier.

Créer un rapport dans l'espace de travail Results

Vous pouvez créer un rapport pour chacun des résultats Petite molécule, Peptide et ADC.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **OK**.
L'affichage Results apparaît.
5. Dans la colonne **Report**, cochez la case correspondant à chaque métabolite à inclure dans le rapport.
Les métabolites non sélectionnés ne sont pas inclus dans le rapport généré.
6. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Create Report**.
La boîte de dialogue Create Report s'ouvre.
7. Sélectionnez un modèle de rapport dans le champ **Available templates**.

Pour voir la liste des modèles, consultez la section [Rapports](#).
8. Cochez les cases **Formats** appropriées pour créer les versions requises des fichiers de rapport ou pour imprimer le rapport.

Remarque : Vous pouvez sélectionner plusieurs formats.

9. Pour chaque version de format sélectionnée, cliquez sur **Browse** puis, dans la boîte de dialogue Browse For Folder, accédez à l'emplacement du fichier de rapport et sélectionnez-le.
10. Cliquez sur **OK**.

Rapports

La boîte de dialogue Browse for Folder apparaît.

11. Pour chaque version de format sélectionnée, saisissez le nom du rapport dans le champ fourni.
12. (Workflow Oligonucléotide) Cochez ou décochez la case **Report grouping table for Results**, le cas échéant.
13. Cliquez sur **Generate Report**.
14. Si l'option **Print report** a été sélectionnée, sélectionnez les options d'impression requises dans la boîte de dialogue Print et cliquez sur **OK**.
Le logiciel génère le rapport.

Créer un rapport dans l'espace de travail Correlation

Vous pouvez créer un rapport de corrélation pour chacun des résultats Petite molécule, Peptide et ADC.

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Correlation**.
L'espace de travail Correlation apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Correlation apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.
4. Cliquez sur **Open**.
L'affichage Correlation Results apparaît.
5. Pour inclure les détails de corrélation du métabolite concerné dans le rapport, cochez la case **Plot**.
6. Dans le volet Workflow, cliquez sur **Create Report**.
La boîte de dialogue Create Report s'ouvre.
7. Sélectionnez un modèle de rapport dans le champ **Available templates**.

Pour voir la liste des modèles, consultez la section [Rapports](#).

Remarque : Si le fichier de corrélation ne contient pas de données groupées, seuls les modèles de rapport dégroupé sont disponibles. Si le fichier de corrélation contient des données groupées, seuls les modèles de rapport dont le nom contient le terme « grouped » s'affichent.

8. Cochez les cases **Formats** appropriées pour créer les versions requises des fichiers de rapport ou pour imprimer le rapport.

Remarque : Vous pouvez sélectionner plusieurs formats.

9. Pour chaque version de format sélectionnée, cliquez sur **Browse** puis, dans la boîte de dialogue Browse For Folder, accédez à l'emplacement de stockage du fichier de rapport et sélectionnez-le.

10. Cliquez sur **OK**.
La boîte de dialogue Browse for Folder apparaît.
11. Pour chaque version de format sélectionnée, saisissez le nom du rapport dans le champ fourni.
12. Cliquez sur **Generate Report**.
13. Si l'option **Print report** est sélectionnée, sélectionnez les options d'impression requises dans la boîte de dialogue Print et cliquez sur **OK**.
Le logiciel génère le rapport.

Copier et coller un graphique

Il est possible de copier des graphiques de l'espace de travail Results ainsi que des boîtes de dialogue Compound Library et Processing Parameters.

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le graphique à copier, puis cliquez sur **Copy Selected Graph**.
Le graphique est copié dans le presse-papiers.
2. Collez le graphique dans une autre application, comme Microsoft Word.

Copier et coller le tableau Potential Metabolites

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau, puis cliquez sur **Copy Table** dans l'espace de travail Results.
Le tableau est copié dans le presse-papiers.
2. Collez le tableau dans Excel.

Les données analogiques permettent de confirmer que les métabolites trouvés à l'aide du spectromètre de masse sont de vrais métabolites et non des faux. Les utilisateurs exploitent la fonction analogique avec le spectromètre de masse pour optimiser l'intégration d'aires analogiques et mieux visualiser l'association des pics MS avec des pics analogiques.

Si un fichier de résultats contenant des données analogiques est ouvert, le bouton **Analog Integration** du tableau Potential Metabolites est activé.

Lorsque l'utilisateur clique sur **Analog Integration**, la boîte de dialogue Analog Integration apparaît.

Le tableau Potential Metabolites initial de l'espace de travail Results s'affiche, avec les exceptions suivantes :

- Les pics analogiques non associés à des pics de masse sont affichés, mais les colonnes concernant le spectromètre de masse sont vides.
- Une colonne supplémentaire, **Analog Signal in Control**, s'affiche juste après la colonne **Analog - R.T. (min)** s'il existe des données de contrôle analogiques. S'il n'y en a pas, cette colonne ne s'affiche pas.

La colonne **Analog Signal in Control** fournit les informations suivantes :

- Si le rapport échantillon/contrôle du pic analogique est supérieur à la valeur spécifiée dans les paramètres de traitement, un X s'affiche dans la colonne.
- Si le rapport échantillon/contrôle du pic analogique est inférieur à la valeur spécifiée dans les paramètres de traitement, une coche s'affiche dans la colonne.

Intégrer manuellement les données analogiques

Conditions préalables :

- | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Les résultats ont été traités avec des données analogiques. |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

1. Dans le volet Workspace, cliquez sur **Results**.
L'espace de travail Results apparaît.
2. Cliquez sur **Open**.
La boîte de dialogue Open Results apparaît.
3. Accédez au fichier approprié, puis sélectionnez-le.

Remarque : Le fichier de résultats doit contenir un chromatogramme analogique.

4. Cliquez sur **OK**.

L'affichage Results apparaît. Si le fichier de résultats contient des données analogiques, le bouton **Analog Integration** du tableau Potential Metabolites est activé. S'il n'en contient pas, le bouton n'est pas disponible.

5. Cliquez sur **Analog Integration**.

La boîte de dialogue Analog Integration apparaît.

Outre le tableau Potential Metabolites, deux chromatogrammes sont affichés. Le premier, Analog Sample, affiche tous les pics analogiques dans la plage de temps de rétention spécifiée dans l'onglet Chromatographic Data des paramètres de traitement génériques. Consultez la section [Onglet Chromatographic Data](#). Le second est le XIC (Extracted Ion Chromatogram) du MS Sample. Il affiche tous les pics de la ligne sélectionnée. Le XIC est mis à jour chaque fois qu'une autre ligne est sélectionnée dans le tableau Potential Metabolites.

6. Sélectionnez le chromatogramme Analog Sample, puis effectuez les tâches suivantes, le cas échéant, pour intégrer les données :

- intégrer manuellement les pics
- modifier l'intégration des pics
- supprimer des pics

Dès que des modifications sont apportées, le logiciel met automatiquement à jour le chromatogramme Analog Sample.

7. (Facultatif) Cochez la case **Show Controls**.

Jusqu'à cinq échantillons de contrôle s'affichent sous le titre du chromatogramme Analog Sample. Consultez la section [Afficher les contrôles](#).

8. (Facultatif) Cliquez sur **Baseline Subtract**.

La soustraction de la référence est appliquée à l'échantillon analogique et aux contrôles. La mention « `baseline subtracted` » est ajoutée au titre du chromatogramme Analog Sample et aux contrôles. Consultez la section [Effectuer une soustraction de la référence](#).

9. (Facultatif) Modifiez le paramètre **R.T. Offset**. Consultez la section [Modifier le décalage du T.R.](#).

Le décalage du temps de rétention est appliqué à l'échantillon analogique et aux traces de contrôle.

10. (Facultatif) Appliquez les **Options** d'intégration analogique. Consultez la section [Définir les options d'intégration analogique](#).

11. Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Cliquez sur **Update Table**. Consultez la section [Mettre à jour le tableau](#).
- Cliquez sur **Update Results and Close**. Consultez la section [Mettre à jour les résultats et fermer](#).

12. Effectuez l'une des opérations suivantes :

- Cliquez sur **Save** pour enregistrer le fichier de résultats ouvert et remplacer la version actuelle.

- Cliquez sur **Save As** pour enregistrer le fichier de résultats ouvert sous un nouveau nom. Le fichier de résultats n'est pas mis à jour.

Afficher les contrôles

1. Dans le volet Chromatograms de la boîte de dialogue Analog Integration, cochez la case **Show controls**.
Le cas échéant, cinq contrôles au maximum s'affichent sous l'intitulé Analog Sample dans le volet Chromatograms. Le cas échéant, cinq contrôles au maximum s'affichent sous l'intitulé MS Sample dans le volet XIC.
2. Cliquez sur l'icône  pour développer la liste et afficher l'échantillon analogique et le contrôle analogique ou l'échantillon MS et le contrôle MS.
3. Cliquez sur l'icône  pour réduire la liste et n'afficher que l'échantillon analogique ou l'échantillon MS.
4. Cochez à nouveau la case **Show controls** pour supprimer les contrôles de l'affichage.

Effectuer une soustraction de la référence

1. Dans le volet Chromatograms de la boîte de dialogue Analog Integration, cliquez sur **Baseline Subtract**.
La référence est soustraite du chromatogramme de l'échantillon analogique. La soustraction de la référence est appliquée à l'échantillon analogique et aux traces de contrôle. La mention « `baseline subtracted` » est ajoutée au nom du chromatogramme de l'échantillon analogique.
2. Cliquez à nouveau sur **Baseline Subtract** pour supprimer la soustraction de la référence.
La mention « `baseline subtracted` » est supprimée du nom du chromatogramme de l'échantillon analogique.

Modifier le décalage du T.R.

Dans le volet Chromatograms de la boîte de dialogue Analog Integration, utilisez les flèches haut et bas dans le champ **R.T. Offset** pour modifier le décalage du temps de rétention. Les pics du chromatogramme d'échantillon analogique sont décalés de la valeur indiquée pour le temps de rétention spécifié. Lors de la mise à jour du tableau Potential Metabolites ou des résultats, les valeurs de la colonne **Analog R.T. (min)** sont actualisées en fonction du décalage du temps de rétention spécifié. Le décalage s'applique à l'échantillon analogique et aux échantillons de contrôle.

Définir les options d'intégration analogique

1. Dans le volet Chromatograms de la boîte de dialogue Analog Integration, cliquez sur **Options**.
La boîte de dialogue Analog Integration Options apparaît.
2. Cochez la case de chaque option à appliquer.

Option	Description
Overlay XIC for peaks at the same analog retention time	Superpose les XIC d'échantillon MS de ces tracés sur des temps de rétention analogiques identiques.
Link x-axis	Lie l'axe des abscisses du chromatogramme d'échantillon analogique au chromatogramme XIC.

3. Cliquez sur **OK**.

Mettre à jour le tableau

Lorsque des modifications sont effectuées dans la boîte de dialogue Analog Integration, l'option **Update Table** est activée.

Cliquez sur **Update Table**.

Les informations dans les colonnes suivantes du tableau Potential Metabolites sont mises à jour en fonction des modifications apportées à l'intégration des pics analogiques, au temps de rétention analogique et à la soustraction de référence :

- L'ID de pic (**Peak ID**) attribué au chromatogramme d'échantillon analogique peut être mis à jour en fonction des intégrations manuelles. Le pic analogique est considéré comme correspondant à un pic MS si le temps de rétention du pic analogique est égal à la rétention du pic MS, selon la tolérance spécifiée.
- Le paramètre **Analog - Peak Area** est mis à jour en fonction des nouvelles aires intégrées.
- Le paramètre **Analog - % Area** est mis à jour en fonction des modifications apportées à l'algorithme. Le paramètre **Analog - % Area** est calculé à partir de tous les pics analogiques (ceux qui sont associés à des pics MS et ceux qui ne le sont pas) dans la plage de temps spécifiée dans l'espace de travail Processing Parameters. Si un pic analogique est associé à plusieurs pics MS, l'aire de pic analogique indiquée pour un M# est calculée proportionnellement à l'aire MS du XIC de ce M#, en utilisant comme total les aires de tous les pics MS associés.
- Le paramètre **Analog - R.T. (min)** est mis à jour en fonction des modifications apportées au décalage du temps de rétention.

Remarque : Ces modifications ne sont pas enregistrées dans le fichier de résultats. Pour les annuler, cliquez sur **Cancel**.

Mettre à jour les résultats et fermer

Lorsque des modifications sont effectuées dans la boîte de dialogue Analog Integration, l'option **Update Results and Close** est activée.

1. Cliquez sur **Update Results and Close**.

Intégration analogique

Un message apparaît, demandant à l'utilisateur de confirmer que les informations analogiques doivent être mises à jour en fonction des modifications apportées.

2. Cliquez sur **Yes**.

La boîte de dialogue Analog Integration apparaît. Les informations dans les colonnes suivantes du tableau Potential Metabolites sont mises à jour en fonction des modifications apportées à l'intégration des pics analogiques, au temps de rétention analogique et à la soustraction de référence :

- L'ID de pic (**Peak ID**) attribué au chromatogramme d'échantillon analogique peut être mis à jour en fonction des intégrations manuelles. Le pic analogique est considéré comme correspondant à un pic MS si le temps de rétention du pic analogique est égal à la rétention du pic MS, selon la tolérance spécifiée.
- Le paramètre **Analog - Peak Area** est mis à jour en fonction des nouvelles aires intégrées.
- Le paramètre **Analog - % Area** est mis à jour en fonction des modifications apportées à l'algorithme. Le paramètre **Analog - % Area** est calculé à partir de tous les pics analogiques (ceux qui sont associés à des pics MS et ceux qui ne le sont pas) dans la plage de temps spécifiée dans l'espace de travail Processing Parameters. Si un pic analogique est associé à plusieurs pics MS, l'aire de pic analogique indiquée pour un M# particulier est calculée proportionnellement à l'aire MS du XIC de ce M# (en utilisant comme total les aires de tous les pics MS associés).
- Le paramètre **Analog - R.T. (min)** est mis à jour en fonction des modifications apportées au décalage du temps de rétention.

Pour obtenir de l'aide sur un sujet particulier, cliquez sur le lien correspondant :

- [Impossible d'ouvrir un fichier de structure](#)
- [Modifier les autorisations utilisateur](#)
- [Aucun métabolite potentiel trouvé](#)
- [Trop de métabolites potentiels trouvés](#)
- [Temps de traitement longs](#)
- [Afficher le dossier ProgramData](#)
- [Problèmes connus et limites](#)

Impossible d'ouvrir un fichier de structure

Vérifiez que le fichier de structure respecte les conventions suivantes :

- Format : mol
- Version : v2000 ou v3000
- Contenu : ne contient pas de texte

Modifier les autorisations utilisateur

Lorsque le logiciel Molecule Profiler est installé, tous les utilisateurs sont autorisés à lire, écrire et supprimer des fichiers dans le dossier des données utilisateur. Si ces autorisations sont modifiées, le logiciel peut ne pas fonctionner correctement.

Remarque : L'emplacement par défaut du dossier utilisateur installé est

C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data.

Aucun métabolite potentiel trouvé

Pour trouver d'autres métabolites dans l'échantillon examiné :

- Sélectionnez une autre stratégie de recherche de pics. Consultez la section [À propos des stratégies de recherche de pics](#).
- Diminuez l'intensité chromatographique minimum dans l'onglet Chromatographic Data. Consultez la section [Onglet Chromatographic Data](#).
- Augmentez la valeur de **MS m/z tolerance** dans le groupe m/z Tolerances de l'onglet MS Parameters. Consultez la section [Onglet MS Parameters](#).
- Diminuez la valeur de **Minimum MS peak intensity** dans le groupe m/z Tolerances de l'onglet MS Parameters. Consultez la section [Onglet MS Parameters](#).

- (Workflows Oligonucléotide) Augmentez la valeur de **Intensity tolerance** dans le groupe Isotope Pattern Tolerances de l'onglet MS Parameters.

Trop de métabolites potentiels trouvés

Pour limiter le nombre de métabolites potentiels trouvés, procédez comme suit :

- Sélectionnez une autre stratégie de recherche de pics. Consultez la section [À propos des stratégies de recherche de pics](#).
- Augmentez l'intensité chromatographique minimum dans l'onglet Chromatographic Data. Consultez la section [Onglet Chromatographic Data](#).
- Diminuez la fenêtre du temps de rétention dans l'onglet Chromatographic Data. Consultez la section [Onglet Chromatographic Data](#).
- Diminuez la fenêtre de plage de masses dans l'onglet MS Parameters. Consultez la section [Onglet MS Parameters](#).
- Augmentez la valeur de **Minimum MS peak intensity** dans le groupe Isotope Pattern Tolerances de l'onglet MS Parameters. Consultez la section [Onglet MS Parameters](#).

Temps de traitement longs

Le temps de traitement dépend de nombreux facteurs, dont la complexité des données, les paramètres de traitement, le poste de travail et le système d'exploitation.

Pour diminuer le temps de traitement, procédez comme suit :

1. Fermez toutes les autres applications en cours d'exécution sur le poste de travail.
2. Modifiez les valeurs des paramètres de traitement. Par exemple :
 - Diminuez le nombre d'algorithmes sélectionnés.
 - Augmentez l'intensité chromatographique minimum dans l'onglet Chromatographic Data.
 - Diminuez la fenêtre du temps de rétention dans l'onglet Chromatographic Data.
 - Augmentez l'intensité de pic MS minimum dans l'onglet MS Parameters.
 - Diminuez la fenêtre de plage de masses dans l'onglet MS Parameters.
 - Diminuez le nombre de filtres de défaut de masse sélectionnés (pour les workflows Petite molécule uniquement).
 - Diminuez le nombre de biotransformations.
 - (Workflows Peptide, Oligonucléotide et ADC) Diminuez le nombre de catabolites générés en ajustant les paramètres propres au composé.

Afficher le dossier ProgramData

Le système d'exploitation Microsoft Windows peut masquer le dossier C:\ProgramData. Après avoir installé le logiciel Molecule Profiler, vérifiez que tous les utilisateurs peuvent voir

le dossier C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data. Si le dossier n'est pas visible, suivez la procédure ci-dessous :

1. Dans File Explorer, cliquez sur **View > Options**.
La boîte de dialogue Folder Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet View.
3. Cliquez sur **Hidden files and folder > Show hidden files, folders, or drives**.
4. Cliquez sur **Apply**.
5. Cliquez sur **OK**.

Problèmes connus et limites

Données de résultats

- Lors de la détermination de l'aire de pic MS, un facteur de conversion horaire de 60 est désormais appliqué aux calculs.

Interprétation

- Lors de la préparation de l'attribution structurale, cliquez toujours sur **Find** après avoir modifié le contenu de la boîte de dialogue Interpret Data. Le logiciel recalcule la liste des formules disponibles en fonction des paramètres sélectionnés.

Corrélation

- Lorsque le facteur de réponse relatif (RRF) d'un métabolite particulier est modifié, l'aire MS est multipliée par la valeur de RRF. L'aire MS mise à jour du métabolite sélectionné s'affiche dans le volet Correlation details, dans chacun des graphiques linéaires, des graphiques à barres et des tableaux.

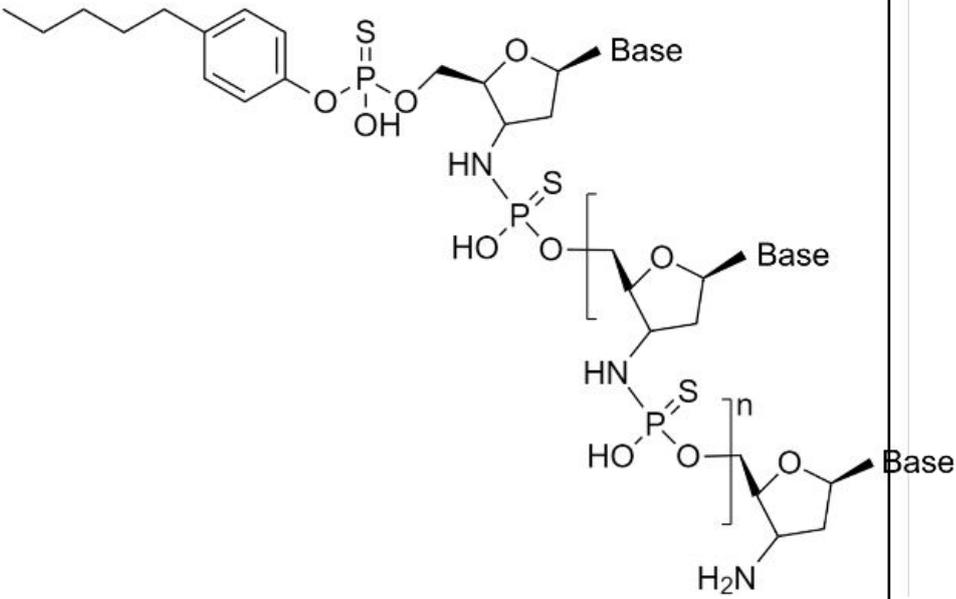
Établissement de rapports

- En cas de conflits avec les modèles de rapport Microsoft Word lors de la création de rapports, vérifiez que toutes les applications Microsoft Office applications sont fermées, puis réessayez.

Exemple d'oligonucléotide personnalisé

A

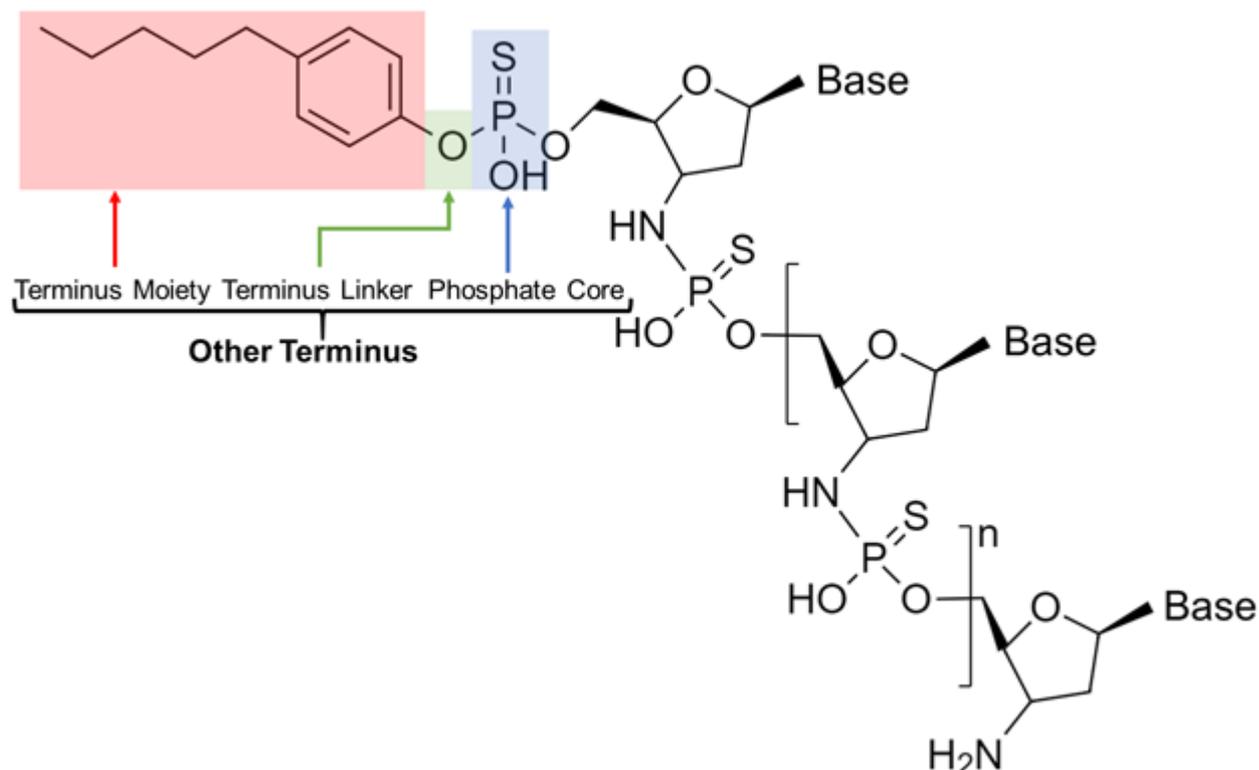
Un oligonucléotide thiophosphoramidate mélangé avec un lieur benzyl pentane couplé à une extrémité 5'-thio-phosphate.

Séquence	Structure chimique, formule et masse mono-isotopique
5'- ATCGATCGTTTAAA- 3'	Illustration A-1 : C₁₄₉H₂₀₃N₆₅O₅₇P₁₄A₁₄ (4695.7400) 

Créer l'autre extrémité

Suivez le schéma général pour identifier les sous-structures constituant la fraction du lieur 5'.

Illustration A-2 : Autre extrémité



1. Cliquez sur **Edit > Custom Elements**.
2. Dans l'onglet Oligo List, cliquez sur **New**.
La boîte de dialogue New Oligo Residue or Terminus apparaît.
3. Dans le champ **Name**, saisissez un nom, par exemple 5' benzyl-pentane terminus.
4. Dans le champ **Symbol**, saisissez un symbole, par exemple /CustomBP/.
5. Dans le champ **Composition Type**, sélectionnez **Other Terminus**.
6. Renseignez les champs pour l'autre extrémité.

Tableau A-1 : Champs pour l'autre extrémité

Champ	Valeur
Terminus Moiety	C11H15
Terminus Linker	O
Phosphate Core	HOPS

7. Cliquez sur **OK**.
Une boîte de dialogue Warning s'affiche avec le message « The "Terminus Moiety" field is usually odd electron. Do you want to continue? ».

- d. Renseignez les champs pour l'autre résidu.

Tableau A-2 : Champs pour Other Residue

Champ	Valeur
Base	C5H4N5
5' Linker	O
Sugar Core	C5H7O
3' Linker	NH
Phosphate Core	HPOS

- e. Cliquez sur **OK**.
Une boîte de dialogue Warning s'affiche, avec le message « The "Sugar Core" field is usually odd electron. Do you want to continue? ».
- f. Cliquez sur **OK**.
4. Pour chacun des trois autres nucléotides, procédez comme suit :
- Sélectionnez **/CustomdA/** puis cliquez sur **New From**.
La boîte de dialogue New Oligo Residue or Terminus apparaît.
 - Renseignez les champs **Name**, **Symbol** et **Base**. Pour les formules de base, consultez le tableau suivant.

Tableau A-3 : Formules de base

Nucléotide	Nom	Symbole	Base
Thymine	Custom dT	/CustomdT/	C5H5N2O2
Guanine	Custom dG	/CustomdG/	C5H4N5O
Cytosine	Custom dC	/CustomdC/	C4H4N3O

- c. Cliquez sur **OK**.

Écrire une séquence personnalisée

- Cliquez sur **New > Oligonucleotide**.
- Dans le volet Sequence, tapez :
/CustomBP/ /CustomdA//CustomdT//CustomdC/ /CustomdG//CustomdA//CustomdT//
CustomdC//CustomdG//CustomdT/ /CustomdT//CustomdT//CustomdA/ /CustomdA//
CustomdA/
- Cliquez dans le champ **Chemical formula**.
C149H203N65O57P14S14 apparaît dans le champ.

Comment le système nomme les métabolites

Les noms sont attribués aux métabolites potentiels de deux manières. Si le pic est un métabolite prédit, le nom est basé sur la biotransformation correspondante, le métabolite de clivage correspondant ou une combinaison des deux. Si le pic n'est pas un métabolite prédit, il est nommé « Loss of » ou « Gain of ».

Le logiciel attribue également une formule potentielle à chaque métabolite. Les utilisateurs peuvent modifier la formule soit en sélectionnant une autre dans la liste des propositions fournies par le logiciel, soit en saisissant une manuellement.

IDA

Une méthode IDA détecte les ions dans des spectres de balayage complets lors de l'acquisition, puis décide en temps réel lesquels analyser par MS/MS.

ID de pic

Le logiciel identifie les métabolites potentiels avec les libellés M1, M2, M3, etc., en fonction du temps de rétention et de la valeur m/z .

Facteur de réponse relatif

Le facteur de réponse relatif ou RRF (Relative Response Factor) est une valeur par laquelle l'aire du pic est multipliée pour augmenter ou diminuer celle-ci artificiellement. Il peut modifier le tracé de cette aire de pic dans le graphique détaillé de corrélation.

Spectre de référence

Spectre MS/MS d'un composé spécifique qui est utilisé lors de l'identification de métabolites potentiels.

Nous contacter

Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europe : Europe.CustomerTraining@sciex.com
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site 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 ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page 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>.

Les dernières versions de la documentation sont disponibles sur le site Web SCIEX, à l'adresse sciex.com/customer-documents.

Remarque : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter sciex.com/contact-us.
