

---

# Software **SCIEX OS**

**para sistema X500 QTOF e sistemas ZenoTOF 7600**

Guia do usuário do software



---

Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou de qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir que o software seja desmontado, passe por engenharia reversa ou descompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou a seus produtos, podendo conter peças cujos nomes estejam registrados como marcas registradas e/ou funcionem como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto, seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou da licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A Sciex não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

**Produto destinado apenas para pesquisa científica.** Não destinado ao uso em procedimentos diagnósticos.

As marcas comerciais e/ou marcas registradas mencionadas neste documento, incluindo as logos associadas, são de propriedade da AB Sciex Pte. Ltd., ou de seus respectivos proprietários, nos Estados Unidos e/ou em outros países.

AB Sciex™ está sendo usada sob licença.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Índice

---

<b>Capítulo 1: Introdução</b> .....	<b>9</b>
Visão geral do software .....	9
Abra o software .....	9
Sobre a página Início.....	9
Painel de visualização e menu de inicialização .....	12
Sobre o Painel de status.....	13
Painel Data Acquisition.....	18
Bloquear a tela .....	19
Desbloqueie o software .....	19
Suporte para caderno eletrônico de laboratório .....	20
Símbolos e convenções da documentação .....	20
<b>Capítulo 2: Instruções de operação—Configuração do dispositivo</b> .....	<b>21</b>
Adicionar dispositivos .....	21
Excluir dispositivos.....	21
Editar as configurações do dispositivo .....	22
<b>Capítulo 3: Instruções de operação — Configuração do software</b> .....	<b>23</b>
Sobre projetos e diretórios raiz .....	23
Adicionar um diretório raiz .....	23
Remover um Diretório raiz.....	24
Especifique uma Conta de rede segura .....	24
Adicionar um projeto .....	24
Adicionar uma subpasta .....	25
Selecionar opções de Queue .....	25
Selecionar Laboratory Information Management System (LIMS) Settings .....	26
Habilitar o modo de tela cheia .....	26
Selecionar configurações regionais .....	26
Gerenciar as bibliotecas de compostos .....	27
Importar um pacote do software LibraryView .....	27
Importar um banco de dados de compostos .....	27
Importar um pacote do software Cliquant .....	28
Importar um arquivo do Excel.....	29
Importar snapshot do banco de dados da biblioteca .....	30
Importar um pacote de biblioteca de terceiros .....	30
Instale um pacote do software LibraryView licenciado .....	31
Conflitos de compostos .....	33
Adicionar composto .....	34
Adicionar um espectro de massas a um composto .....	35
<b>Capítulo 4: Instruções de operação – Fluxos de trabalho do usuário</b> .....	<b>36</b>

## Índice

---

Analistas .....	36
Desenvolvedores de método .....	36
Administradores .....	37
Revisores .....	37
<b>Capítulo 5: Instruções de operação – Aquisição .....</b>	<b>38</b>
Espaço de trabalho MS Method .....	38
Crie um método de MS .....	38
Crie um método de MRM HR usando MRM HR guiado .....	40
Experimentos do método de MS .....	42
Sobre os métodos de MS .....	43
Calcule a energia de colisão dinâmica dos métodos de MS .....	44
Abrir um método de MS .....	45
Executar um método de MS manualmente .....	45
Espaço de trabalho LC Method .....	47
Criar um método de LC .....	47
Espaço de trabalho Batch .....	48
Gerenciar um Batch .....	52
Importar um lote de um arquivo .....	56
Importar um lote de um LIMS .....	57
Criar um lote manualmente .....	58
Use o recurso Plate Layout para criar um lote .....	60
Criar uma tabela de íons de referência .....	61
Calibração do sistema usando o CDS .....	62
Calibração do sistema usando um método de LC .....	63
Gerenciar concentrações do componente .....	63
Gerenciar Regras de decisão .....	64
Equilibrar o sistema .....	65
Enviar um lote .....	66
Envie uma amostra única para a fila no espaço de trabalho Batch .....	67
Envie amostras múltiplas para a fila no espaço de trabalho Batch .....	67
Espaço de trabalho Queue .....	68
Gerenciamento da Queue .....	70
Mostrar ou ocultar colunas .....	72
Ícones do Queue .....	73
Espaço de trabalho MS Tune .....	75
Fazer uma verificação de status rápida .....	76
Otimizar o detector .....	77
Ajustar unidade Q1 .....	78
Ajuste do TOF .....	78
Ajustar Q1 alto .....	79
Calibrar Zeno (Sistemas ZenoTOF) .....	80
Realizar otimização de EAD (Sistemas ZenoTOF) .....	80
Realizar redução de fundo EAD EI (Sistemas ZenoTOF) .....	81
Realizar diagnóstico de EAD (Sistemas ZenoTOF) .....	81
Realizar inicialização de ADC (Sistemas ZenoTOF) .....	82
Solução de problemas avançados .....	82
Restaurar dados do instrumento .....	82



---

<b>Capítulo 6: Instruções de operação – Processamento</b> .....	<b>84</b>
Espaço de trabalho Explorer .....	84
Abrir amostras .....	84
Verificar presença de analito .....	84
Extrair íons .....	85
Abrir um Cromatograma de íons totais .....	86
Abrir um Cromatograma de Pico de Base .....	88
Mostrar a tabela de Data and Peaks .....	90
Mostrar informações da amostra .....	91
Mostrar informações de seleção de gráficos .....	92
Editar configurações em gráficos .....	94
Trabalhar com dados em gráficos .....	95
Usar as ferramentas de operações de dois painéis .....	99
Mover painéis e janelas .....	101
Realizar Suavização Gaussiana .....	102
Dados de Threshold .....	102
Dados do subconjunto usando a seleção de gráfico .....	103
Cromatograma de subtração da referência .....	104
Cromatograma de deslocamento .....	105
Centralizar espectro .....	106
Exportar dados como texto .....	107
Exportar lista de picos como texto .....	108
Imprimir dados .....	108
Reset Options .....	108
Definir opções .....	109
Espaço de trabalho Analytics .....	109
Defina os parâmetros de processamento padrão para o projeto .....	110
Trabalho com Layouts do espaço de trabalho .....	111
Definir configurações de exportação segura do projeto .....	114
Habilite a função Project Modified Peak Warning .....	115
Criar métodos de processamento .....	115
Processar dados .....	117
Trabalhe com a Results Tables .....	125
Revisão dos picos .....	160
Analisar dados usando funções estatísticas .....	173
Exibir a curva de calibração .....	175
Analisar dados com gráficos métricos .....	176
Editar modelos de relatório .....	177
Modelos de relatório .....	179
<b>Capítulo 7: Eventos</b> .....	<b>194</b>
Logs de eventos .....	194
Visualizar os registros .....	195
Registros de arquivos .....	195
Visualizar registros arquivados .....	196
Imprimir registros .....	196
Arquivos do Event Log .....	196

---

<b>Capítulo 8: Auditoria</b> .....	<b>198</b>
Visualizar registros de rastreamento de auditoria.....	198
Filtrar eventos auditados usando uma pesquisa por palavra-chave.....	198
Filtrar eventos auditados usando um conjunto de critérios especificados.....	198
Imprimir rastreamento de auditoria.....	200
<b>Apêndice A: Teoria da operação - Software</b> .....	<b>201</b>
Gerenciamento de dados.....	201
Técnicas de varredura.....	201
Visualização de dados diferente.....	201
Cromatogramas.....	201
Espectros.....	203
Espectros de reconstrução.....	203
Regras de decisão.....	204
Algoritmo Dynamic Background Subtraction.....	204
Análise quantitativa.....	204
Adição padrão.....	205
Reconstrução de massa.....	206
Análise qualitativa.....	207
Precisão de massa.....	207
Tempo de retenção.....	208
Padrão isotópico.....	208
Pesquisa na biblioteca.....	208
Localização de fórmulas.....	209
Integração.....	210
Parâmetros de algoritmos de integração AutoPeak.....	210
Parâmetros do algoritmo de integração MQ4.....	215
Regression.....	217
Equações de regressão.....	218
Tipos de ponderação.....	218
Coeficiente de correlação.....	219
Tipos de regressão.....	219
Remoção automática de valores discrepantes.....	222
Results Tables.....	223
Curvas de calibração.....	224
Proporção sinal/ruído.....	224
Cálculos de ruído relativo e sinal/ruído.....	224
Sinal para ruído usando pico a pico.....	228
Sinal para ruído usando o desvio padrão.....	228
Definir regiões de ruído.....	228
Colunas calculadas.....	229
Navegando na interface Calculated Column.....	229
Extração simples de informações não padrão.....	231
Aritmética simples.....	232
Funções mais complexas.....	232
Declarações <b>IF</b> .....	233
Tratar valores do texto resultante como.....	234

---

<b>Apêndice B: Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato.....</b>	<b>236</b>
Calibrar o sistema em modo de lote.....	236
Calibração do sistema usando o CDS.....	236
Calibração do sistema com o sistema de LC.....	239
Calibração em modo manual.....	242
Calibração do sistema com o CDS.....	242
Calibração do sistema usando um método de LC.....	242
<b>Apêndice C: Massas exatas e fórmulas químicas.....</b>	<b>243</b>
<b>Apêndice D: Tutorial do Explorer.....</b>	<b>245</b>
Introdução.....	245
Instituição.....	245
Opções.....	246
Painéis.....	246
Gráficos.....	251
Sobreposições.....	258
Abrir arquivos.....	259
Cromatogramas e espectros.....	262
Gráficos de contorno e mapas de calor.....	265
Trabalhar com cromatogramas e espectros.....	267
Abrir um arquivo de dados.....	267
Mostrar o TIC para um experimento.....	269
Mostrar um XIC para uma fórmula molecular conhecida.....	271
Gerar e interagir com um espectro.....	275
Usar um gráfico de contorno.....	281
Resumo.....	284
Trabalhar com o explorador de IDA.....	285
Mostrar e juntar espectros.....	285
Filtrar dados IDA.....	290
Usar um espectro de referência.....	292
Resumo.....	293
Trabalhar com ferramentas de estrutura.....	293
Vincular uma estrutura a um espectro MS/MS.....	293
Trabalhar com fragmentos.....	297
Incluir subestruturas em um espectro.....	302
Trabalhar com espectros de MS/MS relacionados.....	303
Resumo.....	306
Trabalhar com várias amostras.....	307
Trabalhar com duas amostras.....	307
Trabalhar com mais de duas amostras.....	314
Resumo.....	321
<b>Entre em contato conosco.....</b>	<b>322</b>
Treinamento do consumidor.....	322
Centro de aprendizagem online.....	322

## Índice

---

SCIEX Support.....	322
Segurança cibernética.....	322
Documentação.....	322

## Visão geral do software

O software SCIEX OS contém controle de instrumentos, aquisição de dados, processamento de dados e funcionalidade de reportar, tudo em um único pacote.

### Abra o software

1. Selecione o software no menu Start:
  - Windows 7: **Start > All Programs > SCIEX > SCIEX OS > SCIEX OS**
  - Windows 10: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

---

**Nota:** Se o serviço **LibraryViewServiceHost** não estiver em execução, a caixa de diálogo User Account Control será mostrada. Clique em **Yes** para iniciar o serviço.

---

Se o software estiver configurado para o modo Integrated, a página Home será aberta.

Se o software estiver configurado para o modo Mixed, a caixa de diálogo Logon será aberta. Continue com a etapa a seguir.

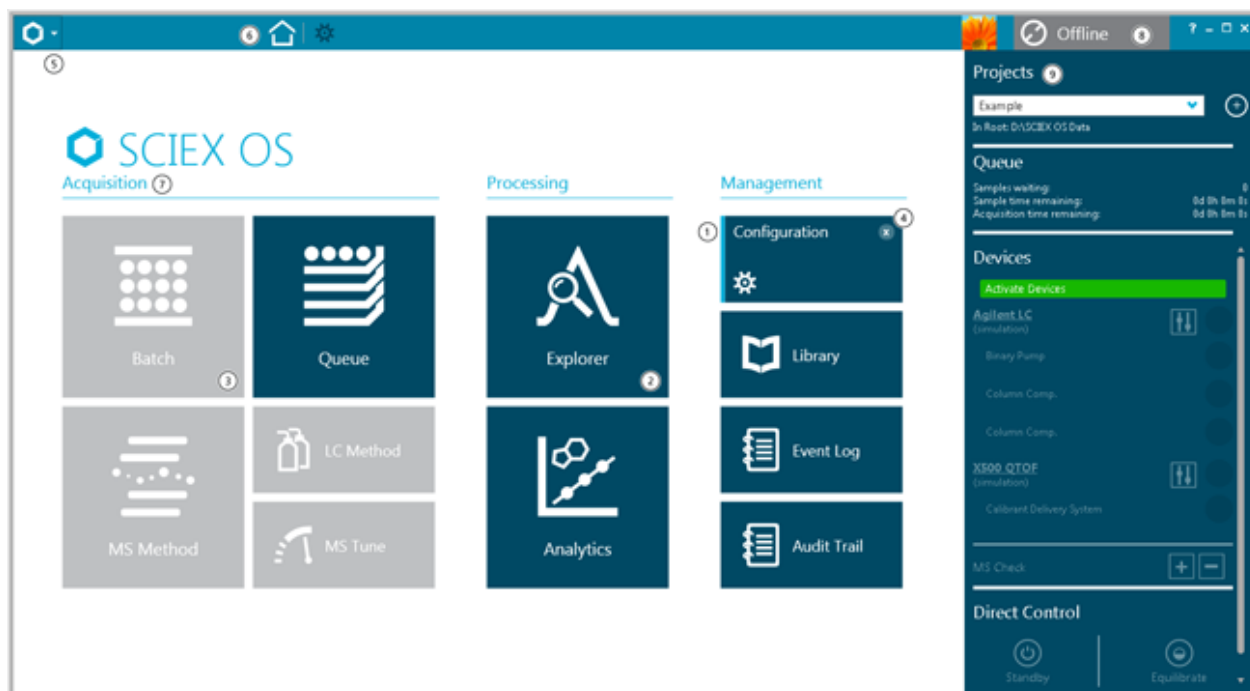
2. Se o software Central Administrator Console (CAC) estiver sendo usado, e o SCIEX OS estiver configurado para administração centralizada, selecione o grupo de trabalho para fazer login.
3. Se a caixa de diálogo Logon estiver aberta, digite o nome de usuário e a senha de um usuário que esteja autorizado a usar o software e, em seguida, clique em **OK**.  
A página Home é aberta.

### Sobre a página Início

A página Início consiste de blocos do espaço de trabalho agrupados por funções, o painel de status, a faixa e o menu de inicialização. O acesso ao espaço de trabalho é determinado pelo papel designado ao usuário, bem como a licença.

## Introdução

Figura 1-1: Página Início



Item	Descrição
1	Uma linha vertical azul claro à esquerda de um ícone azul escuro indica que o espaço de trabalho está aberto, que o trabalho está em andamento e que o usuário tem acesso às funcionalidades. O status do espaço de trabalho aberto é exibido no bloco.
2	Um bloco azul escuro indica que o espaço de trabalho está fechado.
3	Um bloco cinza indica que o espaço de trabalho não está habilitado.
4	O ícone para fechar (x) é exibido no canto superior direito do ícone quando o espaço de trabalho está habilitado.
5	Acesso ao menu de inicialização. O menu de inicialização contém uma lista de todos os espaços de trabalho. Clique em ▾ à direita do ícone para abrir o menu de inicialização.
6	Para o painel de visualização, Consulte a seção: <a href="#">Painel de visualização e menu de inicialização</a> . Para acessar outro espaço de trabalho, clique em um deles na lista. O espaço de trabalho aberto no momento permanece ativo e o ícone do espaço de trabalho é exibido no painel. Para fechar o espaço de trabalho ativo, clique em  Para retornar à página Início, clique em
7	Funções: Acquisition, Processing e Management. O acesso é dependente da função designada ao usuário e ao licenciamento.

Item	Descrição
8	Status do sistema. Clique na barra de título para exibir ou ocultar o painel de status.
9	O painel de status. Consulte a seção: <a href="#">Sobre o Painel de status</a> .

Tabela 1-1: Funções

Rótulo	Descrição
<b>Acquisition</b>	(Aquisição) Use as funções no grupo Acquisition para criar métodos e lotes e enviar amostras para aquisição. Os usuários também podem ajustar o espectrômetro de massas usando o MS Tune.
<b>Processing</b>	(Processamento) Use essas funções no grupo Processing para processar dados quantitativa ou qualitativamente.
<b>Management</b>	(Gerenciamento) Use essas funções no grupo Management para configurar dispositivos, acesso ao software ou visualizar o registro do evento.

Tabela 1-2: Blocos

Rótulo	Descrição
<b>Batch</b>	(Lote) Use o espaço de trabalho Batch para criar lotes e enviá-los para a fila. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho Batch</a> .
<b>Queue</b>	(Fila) Use o espaço de trabalho Queue para monitorar o status de aquisição e processamento e para gerenciar amostras na fila. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho Queue</a> .
<b>MS Method</b>	(Método de MS) Use o espaço de trabalho MS Method para criar e editar os métodos MS. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho MS Method</a> .
<b>LC Method</b>	(Método de LC) Use o espaço de trabalho LC Method para criar e editar métodos LC. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho LC Method</a> .
<b>MS Tune</b>	(Ajuste MS) Use o espaço de trabalho MS Tune para otimizar o espectrômetro de massas. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho MS Tune</a> .
<b>Explorer</b>	(Explorador) Use o espaço de trabalho Explorer para examinar os dados adquiridos. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho Explorer</a> .

## Introdução

Tabela 1-2: Blocos (continuação)

Rótulo	Descrição
<b>Analytics</b>	(Análise) Use o espaço de trabalho Analytics para processar e revisar os dados adquiridos. Consulte a seção: <a href="#">Espaço de trabalho Analytics</a> .
<b>Configuration</b>	(Configuração) Use o espaço de trabalho Configuration para configurar o software, adicionar e ativar dispositivos, atribuir funções do usuário e criar e atribuir mapas de auditoria. Consulte o documento: <i>Sistema de ajuda</i> .
<b>Library</b>	(Biblioteca) Use o espaço de trabalho <b>Library</b> para gerenciar bibliotecas compostas.
<b>Event Log</b>	(Log de eventos) Use o espaço de trabalho Event Log para visualizar eventos do sistema, incluindo erros e avisos. Consulte o documento: <i>Guia do diretor do laboratório</i> .
<b>Audit Trail</b>	(Trilha de auditoria) Use o espaço de trabalho Audit Trail para visualizar registros de eventos de software, como alterações de configuração e processamento de dados. Consulte o documento: <i>Guia do diretor do laboratório</i> .

## Painel de visualização e menu de inicialização

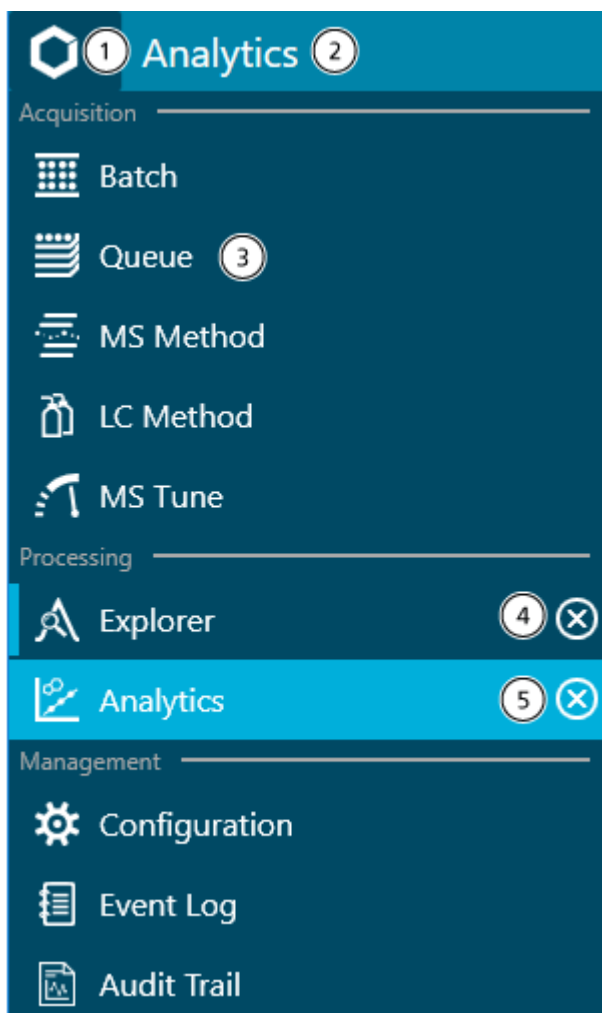
Figura 1-2: Painel de visualização






Item	Descrição
1	Permite que o usuário abra outro espaço de trabalho selecionando-o na lista. Esse espaço de trabalho torna-se o espaço de trabalho ativo. O espaço de trabalho anterior permanece aberto. Consulte a figura: <a href="#">Figura 1-3</a> .
2	Exibe o nome do espaço de trabalho ativo.
3	Abre a página Início.
4	Mostra os espaços de trabalho abertos. O espaço de trabalho ativo é mostrado em branco. Para ativar um espaço de trabalho aberto, clique no ícone espaço de trabalho.
5	Exibe o usuário atualmente logado.
6	Exibe o status do sistema. Consulte a seção: <a href="#">Sobre o Painel de status</a> .
7	Abre o Sistema de ajuda. Clique em ?.



Figura 1-3: Menu de inicialização



Item	Descrição
1	Mostra a lista de espaços de trabalho. Clique em  .
2	Exibe o nome do espaço de trabalho ativo.
3	Exibe o status dos espaços de trabalho. Um fundo azul escuro indica que o espaço de trabalho está fechado. Uma barra vertical azul clara à esquerda indica que o espaço de trabalho está aberto. Um fundo azul claro indica que o espaço de trabalho está ativo.
4	Fecha um espaço de trabalho aberto. Clique em  .
5	Fecha o espaço de trabalho ativo. Clique em  .

## Sobre o Painel de status

Para abrir este painel, clique na barra de título do painel. Consulte a figura: [Figura 1-2](#).

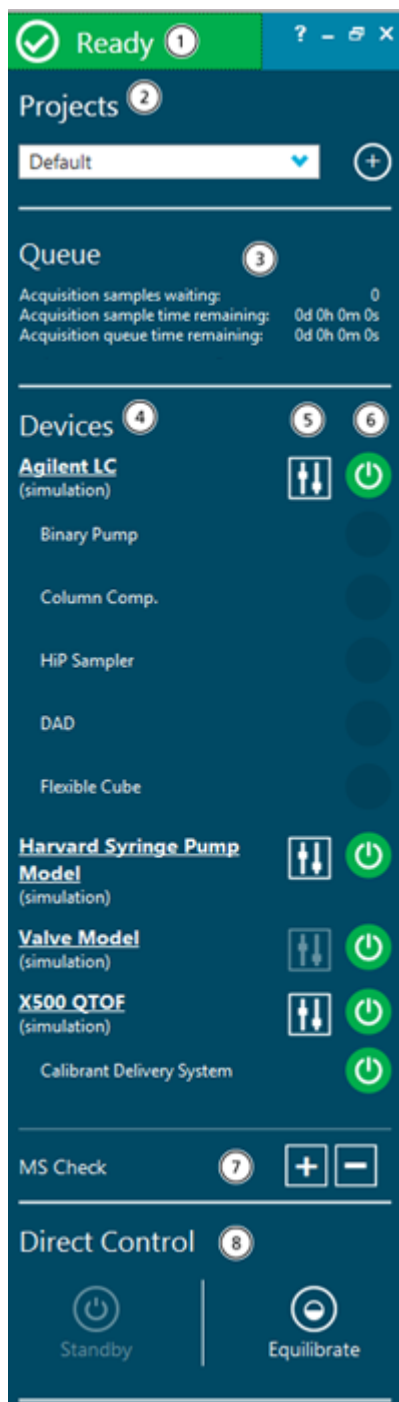
## Introdução

---

O ícone, o texto e a cor da barra de status variam para indicar o status do sistema. Use o painel de status para fazer o seguinte:


- Adicione ou selecione um projeto.
- Visualize as amostras restantes na fila e o tempo restante estimado para que o lote seja adquirido.
- Visualize o número de amostras restantes na fila e o tempo estimado restante para que a fila seja completada.
- Visualize o status do sistema ou o status de dispositivos individuais que foram ativados na lista de dispositivos no espaço de trabalho Configuration.
- Acesse o controle do dispositivo direto para iniciar ou parar dispositivos.
- Visualize detalhes do dispositivo.
- Deixe o espectrômetro de massas ou sistema LC em Standby.
- Verifique e calibre os modos TOF MS e TOF MS/MS.
- Equilibrar o sistema.

Figura 1-4: Painel de status do SCIEX OS



## Introdução

---

Item	Descrição
1	Exibe o status do sistema. Clique na barra de título para exibir ou ocultar o painel de status. <ul style="list-style-type: none"><li>• Ready é indicado em verde</li><li>• Offline é indicado em cinza.</li><li>• Equilibrating, running, e loading são indicados em azul.</li><li>• Stop e stopping são indicados em amarelo.</li><li>• Falhas são indicadas em vermelho.</li></ul>
2	Exibe o projeto atual. Para mudar para um projeto existente, selecione-o na lista. Para adicionar um projeto, clique em <b>Create Project</b> (  ), digite o nome do projeto e, em seguida, clique em <b>OK</b> .
3	Mostra o status das amostras selecionadas na lista.
4	Exibe o status do dispositivo. Clique no título do dispositivo para abrir a caixa de diálogo Device Details e visualizar os detalhes. Se os dispositivos estiverem inativos, o botão <b>Activate Devices</b> será mostrado nesta seção do Painel de status. Clique neste botão para ativar os dispositivos.
5	Clique no ícone <b>Direct Device Control</b> para acessar os controles do dispositivo. A seringa opcional pode ser iniciada ou interrompida na caixa de diálogo Device Control.
6	Exiba o status do dispositivo. O ícone é um indicador para somente visualizar o status do dispositivo.
7	Clique para acessar os procedimentos do Ajuste MS.
8	Clique no botão apropriado para equilibrar o sistema ou vá para o estado Standby. Consulte a seção: <a href="#">Equilibrar o sistema</a> .

**Tabela 1-3: Seções do Painel de status**


Rótulo	Descrição
Projects	(Projetos) Mostra o projeto atual. Clique em <b>Create Project</b> (  ) para criar um projeto. Consulte a seção: <a href="#">Adicionar um projeto</a> .

Tabela 1-3: Seções do Painel de status (continuação)




Rótulo	Descrição
<b>Queue</b>	(Fila) Mostra o status das amostras na fila. As informações são fornecidas para: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Samples waiting</b> (Espera de amostras)</li> <li>• <b>Sample time remaining</b> (Tempo restante da amostra)</li> <li>• <b>Acquisition time remaining</b> (Tempo restante da aquisição)</li> </ul> Consulte a seção: <a href="#">Gerenciamento da Queue</a> .
<b>Devices</b>	(Dispositivos) Lista os dispositivos na configuração ativa. Nessa lista, os dispositivos podem ser gerenciados das seguintes formas: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Clique no nome do dispositivo para abrir e visualizar a caixa de diálogo Device Details.</li> <li>• Visualize o status do ícone ou mova o cursor sobre o ícone de status para exibir o status do dispositivo.</li> <li>• Clique em <b>Direct device control</b> () para abrir a caixa de diálogo Device Control.</li> </ul>
<b>MS Check</b>	(Verificação MS) Realiza o procedimento de ajuste MS no modo Positivo (+) ou Negativo (-).
<b>Direct Control</b>	(Controle direto) Permite que o usuário controle o dispositivo manualmente. Clique em <b>Standby</b> para colocar o sistema no estado Standby. Clique em <b>Equilibrate</b> para abrir a caixa de diálogo Equilibrate. Consulte a seção: <a href="#">Equilibrar o sistema</a> .

Tabela 1-4: Funções do Painel de status

Para fazer isto	Faça isto
Mostrar o painel de status	Clique na barra de título do painel de status, na parte superior do painel de status minimizado. Consulte a figura: <a href="#">Figura 1-2</a> .
Ocultar o painel de status	Clique na barra de título do painel de status quando estiver sendo exibido.
Alterar o projeto ativo	Selecione um projeto na lista <b>Projects</b> no painel de status.  <b>Dica!</b> Clique em <b>Create Project</b> (  ) para criar um projeto. Digite o nome do projeto e, em seguida, clique em <b>OK</b> .

**Tabela 1-4: Funções do Painel de status (continuação)**

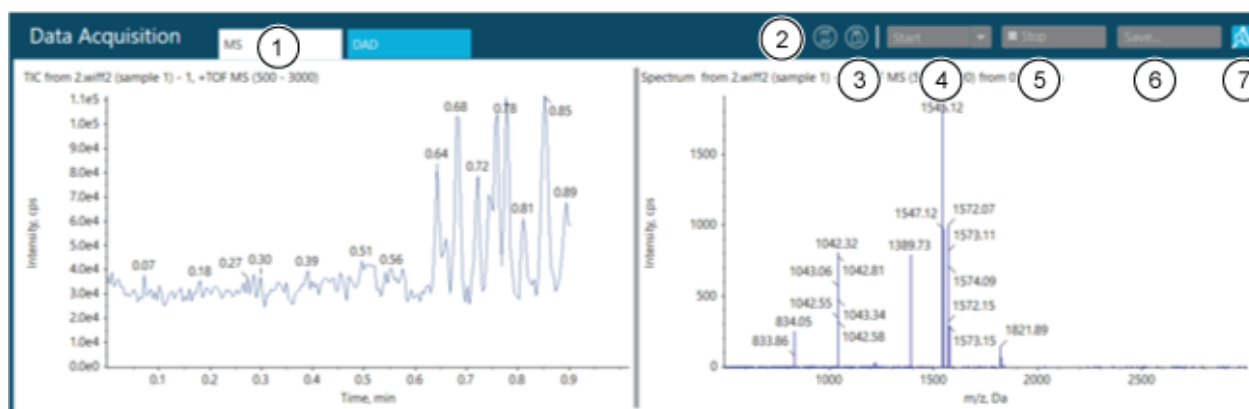
Para fazer isto	Faça isto
Controle o status do dispositivo	<ol style="list-style-type: none"> <li>No painel de status, clique no ícone <b>Direct device control</b>  à direita do título do dispositivo. A caixa de diálogo Device Control será aberta.</li> <li>Inicie, pare ou atualize o dispositivo, conforme solicitado.</li> <li>Clique em <b>OK</b>.</li> </ol> <p>Utilize esse recurso para obter feedback detalhado no status de um dispositivo. Por exemplo, temperaturas, pressões e tensões. Para monitorar o status do dispositivo, clique no ícone na extrema direita do título do dispositivo.</p>

## Painel Data Acquisition

Use o painel Data Acquisition para iniciar e monitorar a aquisição de dados em tempo real. Usuários também podem editar os parâmetros do método de aquisição durante aquisição de dados, além de salvar dados ou abrir dados no espaço de trabalho Explorer.

**Dica!** Clique na parte superior do painel Data Acquisition e, em seguida, arraste-o para cima ou para baixo para redimensionar o conteúdo.

**Figura 1-5: Painel Data Acquisition**



Item	Descrição
1	Exibe o TIC e o espectro ou XIC. Se um detector estiver ativo, os dados de DAD ou UV também serão mostrados.
2	Método MS. Passe o cursor para exibir o nome do método de MS que está sendo executado.

---

Item	Descrição
3	Método de LC. Passe o cursor para exibir o nome do método de LC que está sendo executado.
4	Clique em <b>Start</b> para iniciar a aquisição manual. Clique em <b>Start &gt; Start with LC</b> para abrir a caixa de diálogo Start with LC.
5	Clique para parar a aquisição manual.
6	Clique para salvar os dados.
7	Clique para ver os dados em tempo real.

## Bloquear a tela

Para evitar acesso não autorizado ao software quando ninguém estiver por perto da estação de trabalho, bloqueie o software. Enquanto o software está bloqueado, qualquer aquisição ou processamento em andamento continua.

Quando o tempo de logoff automático expirar, ocorrerá o logoff do usuário. A aquisição continua.

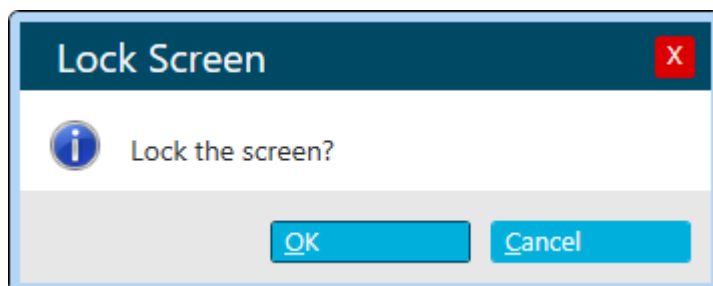
---

**Nota:** O logoff não ocorrerá se o processamento estiver em andamento ou se a Results Table não tiver sido salva.

---

1. Pressione **Ctrl+Q**.

**Figura 1-6: Caixa de diálogo Lock Screen**



2. Clique em **OK**.  
A caixa de diálogo SCIEX OS is Locked é aberta.

## Desbloqueie o software

Se o software estiver bloqueado, o usuário que estiver com sessão iniciada no momento poderá desbloqueá-lo.

---

**Nota:** Outros usuários não podem desbloquear o software, mas um usuário com a permissão **Force User Logoff** poderá fazer logoff do usuário atual.

---

## Introdução

---

Na caixa de diálogo SCIEX OS is Locked, digite a senha para o usuário atual e em seguida clique em **Unlock**.

## Suporte para caderno eletrônico de laboratório

Nenhuma solução específica de caderno eletrônico de laboratório (ELN) é compatível com a SCIEX, mas a SCIEX oferece produtos, ferramentas e serviços para facilitar a importação e exportação de dados para integração com sistemas de ELN:

- **Batch Creation:** o SCIEX OS pode importar arquivos de lote em formato csv e txt. Consulte [Espaço de trabalho Batch](#).
- **Results Upload:** o SCIEX OS pode exportar dados para um arquivo txt para uso em um sistema LIMS. Consulte [Espaço de trabalho Analytics](#).

## Símbolos e convenções da documentação

Os seguintes símbolos e convenções são usados ao longo do guia.



---

**PERIGO!** Perigo significa uma ação que leva a lesão grave ou morte.

---



---

**AVISO!** Aviso significa uma ação que pode causar lesão pessoal se as precauções não forem seguidas.

---

---

**CUIDADO:** Cuidado significa uma operação que pode causar dano ao sistema ou corrupção ou perda de dados se as precauções não forem seguidas.

---

---

**Nota:** Nota enfatiza a informação significativa em um procedimento ou descrição.

---

---

**Dica!** Dica fornece informações úteis que ajudam a aplicar técnicas e procedimentos no texto para uma necessidade específica e fornece atalhos, mas não é essencial para a conclusão de um procedimento.

---



# Instruções de operação— Configuração do dispositivo

# 2

Use o espaço de trabalho Configuration para:

- Ativar e desativar dispositivos
- Adicionar e deletar dispositivos
- Editar as configurações do dispositivo
- Testar os dispositivos

## Adicionar dispositivos

**Nota:** Para evitar problemas de ativação, sempre adicione o espectrômetro de massas antes de adicionar qualquer outro dispositivo.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Devices**.
3. Se qualquer dispositivo estiver ativos, clique em **Deactivate**.
4. Clique em **Add**.  
A caixa de diálogo Device abrirá.
5. Na lista **Type**, selecione o tipo necessário.
6. Na lista **Model**, selecione o modelo necessário.
7. Clique em **Settings** para editar as configurações ou restaurar os valores padrões.
8. Clique em **Test Device** para verificar se o dispositivo está configurado corretamente e disponível para uso.
9. Clique em **Save**.
10. Repita a etapa [até a etapa 9](#) conforme necessário.
11. Marque a caixa de seleção **Activate** ao lado de cada dispositivo a ser ativado e, em seguida, clique em **Activate Devices**.  
Todos os dispositivos selecionados são ativados.
12. Para editar ou excluir dispositivos, consulte o Sistema de ajuda.

## Excluir dispositivos

**Nota:** Se o dispositivo que está sendo deletado é parte de um sistema integrado, então todos os dispositivos no sistema integrado serão excluídos. Os usuários não podem excluir um dispositivo em um sistema integrado.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Devices**.
3. Clique em **Deactivate**.
4. Selecione um dispositivo.
5. Clique em **Delete**.
6. Marque a caixa de seleção **Activate** ao lado de cada dispositivo a ser ativado e, em seguida, clique em **Activate Devices**.  
Todos os dispositivos selecionados são ativados.

## Editar as configurações do dispositivo

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Devices**.
3. Se os dispositivos estiverem ativos, clique em **Deactivate**.
4. Selecione o dispositivo a ser editado.
5. Clique em **Edit**.  
A caixa de diálogo Device abrirá.
6. (Opcional) Edite as propriedades do dispositivo na seção **Device Display Names**. Para obter informações sobre as propriedades, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
7. (Opcional) Clique em **Settings** para visualizar e alterar informações adicionais sobre o dispositivo. Use a caixa de diálogo Settings para realizar estas tarefas:
  - Clique em **Restore Defaults** para restaurar as configurações padrão do dispositivo.
  - Clique em **Test Device** para verificar se o dispositivo está configurado corretamente e disponível para uso. Se o teste for bem-sucedido, a caixa de diálogo Settings será fechada.
8. Clique em **Test Device** para verificar se o dispositivo está configurado corretamente e disponível para uso.  
Se o teste for bem-sucedido, uma mensagem em verde será exibida. Caso contrário, uma mensagem indicará que a configuração não é válida e requer atualização.
9. Clique em **Save**.
10. Marque a caixa de seleção **Activate** ao lado de cada dispositivo a ser ativado e, em seguida, clique em **Activate Devices**.  
Todos os dispositivos selecionados são ativados.

# Instruções de operação — Configuração do software

# 3

Para obter informações sobre a configuração de usuários e de funções, consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

## Sobre projetos e diretórios raiz

Um diretório raiz é uma pasta que contém um ou mais projetos. É a pasta em que o software procura os dados do projeto. O diretório raiz predefinido é `C:\SCIEX OS Data`.

Para se certificar de que as informações do projeto estão armazenadas em segurança, crie projetos usando o SCIEX OS. Consulte a seção: [Adicionar um projeto](#).

Os dados do projeto podem ser organizados em subpastas. Crie as subpastas com o SCIEX OS. Consulte a seção: [Adicionar uma subpasta](#).

---

**Nota:** Para grupos de trabalho administrados pelo software Central Administrator Console (CAC), a configuração do software CAC controla a capacidade de gerenciar projetos com SCIEX OS. Se a opção **Use central settings for projects** for selecionada no software CAC, a página Projects será somente leitura.

---


## Adicionar um diretório raiz

Diretório raiz é a pasta em que um ou mais projetos são armazenados.

---

**Nota:** O software salva até dez diretórios raízes.

---

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Projects**.
3. Na seção **Advanced**, clique em **Create Root** (  ) ao lado do campo **Current root directory**.
4. Digite o caminho completo da pasta do diretório raiz.  
A pasta é criada.

---

**Dica!** Em vez de digitar o caminho, clique em **Browse** e, em seguida, selecione a pasta em que o diretório raiz será criado. Digite "\" e o nome da pasta do diretório raiz no fim do caminho.

---

---

**Dica!** Em alternativa, crie uma pasta no File Explorer e, em seguida, vá até lá e selecione a pasta.

---

**Nota:** Para instalações do SCIEX OS com uma licença de processamento, o diretório raiz pode ser, no software Analyst, uma pasta `Analyst Data\Projects`.

---


5. Clique em **OK**.  
O novo diretório raiz torna-se o diretório raiz para o projeto atual.

## Remover um Diretório raiz

O software mantém uma lista dos últimos dez diretórios raízes que foram usados. O usuário pode remover os diretórios raízes dessa lista.

**Nota:** O **Current root directory** não pode ser excluído.

---

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Projects**.
3. Na seção **Advanced**, clique em  ao lado do campo **Current root directory**.  
A caixa de diálogo Clear Root Directory é aberta.
4. Selecione as pastas a serem removidas da lista de diretórios raízes e em seguida clique em **OK**.


## Especifique uma Conta de rede segura

Se os projetos forem armazenados em um recurso de rede, uma SNA poderá ser especificada, para certificar-se de que todos os usuários da estação de trabalho possuem o acesso exigido ao recurso da rede.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Projects**.
3. Na seção **Advanced**, clique em **Credentials for Secure Network Account**.
4. Digite o nome de usuário, senha e domínio da conta da rede segura definida no recurso da rede.
5. Clique em **OK**.

## Adicionar um projeto


O projeto armazena métodos de aquisição, dados, lotes, métodos de processamento, resultados de processamento etc. Recomendamos o uso de pastas de projeto separadas para cada um.

**Dica!** Projetos também podem ser criados clicando em **Create Project** (  ) no painel de status.

---


Não crie projetos nem copie ou cole arquivos fora do SCIEX OS.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
-

2. Clique em **Projects**.
3. Clique em **Create Project** (  ) ao lado do campo **Current Project**.  
A caixa de diálogo New Project é aberta.
4. Digite o nome do projeto.
5. Clique em **OK**.

## Adicionar uma subpasta

Dentro dos projetos, os dados podem ser organizados em subpastas.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Projects**.
3. Clique em **Add Data Sub-Folders to any Project**.  
A caixa de diálogo Add Data Sub-Folders é aberta.
4. No campo **SCIEX OS Project**, selecione o projeto ao qual a subpasta será adicionada.
5. Clique em **Add a new data sub-folder** (  ) acima da caixa na seção **Project Data Sub-Folders**.  
A caixa de diálogo Data Sub-Folder Name se abre.
6. Digite o nome da subpasta.
7. Clique em **Save**.
8. Feche a caixa de diálogo Add Data Sub-Folders.

## Selecionar opções de Queue

O software processa as amostras enviadas na lista sequencialmente, executando cada amostra com o método de aquisição selecionado. Após a aquisição de todas as amostras, a fila para e o sistema entra em estado Ready. Depois que o tempo definido no campo Instrument Idle Time acaba, o sistema entra em Standby. No estado Standby, as bombas e o forno da coluna LC são desligados e algumas voltagens do espectrômetro de massa são desativadas. O controle de temperatura do amostrador automático permanece ativado para evitar degradação da amostra.

Somente um usuário que tenha permissão para gerenciar a fila pode modificar a extensão de tempo de execução da fila depois que a última aquisição termina, antes de colocar o instrumento em Standby.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **Queue**.
3. Selecione as opções de fila conforme necessário. Para obter descrições das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
4. Clique em **Save**.

## Selecionar Laboratory Information Management System (LIMS) Settings

Utilize esse recurso para conectar a um servidor LIMS. Os usuários podem importar informações de lote, como também exportar resultados, a partir de um LIMS.

---

**Nota:** Este procedimento não é necessário para conexão a um Watson LIMS.

---

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **LIMS Communication**.
3. Para comunicar-se com um LIMS, digite o URL do servidor LIMS no campo **LIMS Server** e, em seguida, selecione **Enable import from the specified LIMS server**.

---

**Nota:** O departamento de TI do cliente ou do fornecedor do middleware é responsável por configurar o servidor LIMS. Entre em contato com esse departamento para obter o URL ou a localização do servidor.

---

4. Clique em **Save**.

## Habilitar o modo de tela cheia

Selecione este recurso para utilizar o SCIEX OS como o aplicativo primário. Os usuários não podem fechar o software ou acessar outros programas de software.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **General**.
3. Em **General**, marque a caixa de seleção **Enabled** para habilitar **Full Screen Mode**.
4. Clique em **Save**.

## Selecionar configurações regionais

Esse recurso se aplica à configuração de região e idioma selecionados no Control Panel. Somente um ponto final "." ou vírgula "," podem ser usados como um separador de decimal. O grupo de dígitos não é compatível.

1. Abra o espaço de trabalho Configuration.
2. Clique em **General**.
3. Em **Regional Settings**, clique em **Apply**.  
As configurações regionais definidas no sistema operacional Windows são aplicadas ao software após o computador ser reiniciado.
4. Clique em **Save**.
5. Reinicie o computador.

## Gerenciar as bibliotecas de compostos

### Importar um pacote do software LibraryView

1. Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
2. Clique em **All Compounds**.
3. Clique no ícone **Import**.
4. Clique em **LibraryView Package (\*.lbp)** na caixa de diálogo Library Importer.
5. Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.
6. Selecione o arquivo e clique em **Open**.
7. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound** na caixa de seleção para importar todos os compostos.
  - Clique dentro da linha apropriada para importar compostos individuais.

---

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem com os critérios especificados.

---

8. Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Selecione a biblioteca apropriada na lista **Add to Compound Library**.
  - Digite o nome da biblioteca no campo da lista **Add to Compound Library**.
9. Clique em **Next**.

---

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

10. Resolva os conflitos necessários.
11. Clique em **Finish**.

### Importar um banco de dados de compostos

1. Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
2. Clique em **All Compounds**.
3. Clique no ícone **Import**.
4. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **DiscoveryQuant Compound Database (\*.mdb)**.
  - Clique em **Analyst Compound Database (\*.mdb)**.

## Instruções de operação — Configuração do software

---

5. Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.
6. Selecione o arquivo e clique em **Open**.
7. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound** na caixa de seleção para importar todos os compostos.
  - Clique dentro da linha apropriada para importar compostos individuais.

---

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem com os critérios especificados.

---

8. Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Selecione a biblioteca apropriada na lista **Add to Compound Library**.
  - Digite o nome da biblioteca no campo da lista **Add to Compound Library**.
9. Clique em **Next**.

---

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

10. Resolva os conflitos necessários.
11. Clique em **Finish**.

## Importar um pacote do software Cliquid

1. Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
2. Clique em **All Compounds**.
3. Clique no ícone **Import**.
4. Clique em **Cliquid Package (\*.clq)** na caixa de seleção Library Importer.
5. Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.
6. Selecione o arquivo e clique em **Open**.
7. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound** na caixa de seleção para importar todos os compostos.
  - Clique dentro da linha apropriada para importar compostos individuais.

---

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem com os critérios especificados.

---



- Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Selecione a biblioteca apropriada na lista **Add to Compound Library**.
  - Digite o nome da biblioteca no campo da lista **Add to Compound Library**.
- Clique em **Next**.
- Digite o nome do espectrômetro de massas no campo **Instrument Name**, se necessário, na caixa de diálogo Instrument Name.
- Clique em **OK**.

---

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

- Resolva os conflitos necessários.
- Clique em **Finish**.

### Importar um arquivo do Excel

- Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
- Clique em **All Compounds**.
- Clique no ícone **Import**.
- Clique em **Excel file (\*.xls)** na caixa de diálogo Library Importer.
- Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.
- Selecione o arquivo e clique em **Open**.
- Selecione a **Excel worksheet to import** adequada na caixa de diálogo Library Importer.
- Se a planilha contiver cabeçalhos de colunas, marque a caixa de seleção ao lado de **Selected Excel Worksheet has headers**.
- Digite o nome do espectrômetro de massas no campo **Instrument Name**, se necessário, na caixa de diálogo Instrument Name.
- Selecione o título apropriado para cada coluna de informação.

---

**Dica! Compound:CompoundId e Compound:Name** são seleções obrigatórias. Selecione **---[not used]---** para obter informações não necessárias.

---

- Clique em **Next**.
- Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound** na caixa de seleção para importar todos os compostos.
  - Clique dentro da linha apropriada para importar compostos individuais.

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem com os critérios especificados.

---

- Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Selecione a biblioteca apropriada na lista **Add to Compound Library**.
  - Digite o nome da biblioteca no campo da lista **Add to Compound Library**.
- Clique em **Next**.

---

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

- Resolva os conflitos necessários.
- Clique em **Finish**.

## Importar snapshot do banco de dados da biblioteca

---

**CUIDADO: Potencial perda de dados. Faça back up do banco de dados do software LibraryView atual antes de realizar esse procedimento. As informações neste pacote substituem todos os dados existentes no banco de dados do software LibraryView. A opção Cancel não fica disponível depois que a importação começa.**

---

- Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
- Clique em **All Compounds**.
- Clique no ícone **Import**.
- Clique em **Overwrite Database with Library Snapshot (\*.lbp)** na caixa de diálogo Library Importer.
- Clique em **Yes** na caixa de diálogo Warning.
- Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.
- Selecione o arquivo e clique em **Open**.
- Clique em **Finish**.

## Importar um pacote de biblioteca de terceiros

- Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
- Clique em **All Compounds**.
- Clique no ícone **Import**.
- Clique em **Third Party Library Package (\*.tulp)** na caixa de diálogo Library Importer.
- Procure o arquivo apropriado na caixa de diálogo Open.

6. Selecione o arquivo e clique em **Open**.
7. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound** na caixa de seleção para importar todos os compostos.
  - Clique dentro da linha apropriada para importar compostos individuais.

---

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem com os critérios especificados.

---

8. Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Selecione a biblioteca apropriada na lista **Add to Compound Library**.
  - Digite o nome da biblioteca no campo da lista **Add to Compound Library**.
9. Clique em **Next**.

---

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

10. Resolva os conflitos necessários.
11. Clique em **Finish**.

## Instale um pacote do software LibraryView licenciado

---

**Nota:** O software LibraryView deve estar instalado.

---

**Nota:** O acesso à Internet é necessário para obter a licença do software LibraryView. Se um computador não tiver acesso à Internet, faça uma cópia do ID gerado pelo computador. No computador com acesso à Internet, acesse a página da licença no site da SCIEX e siga as instruções para obter a licença.

---

Uma biblioteca licenciada pode ser instalada a partir de um DVD ou de um arquivo .zip que pode ser baixado do site da SCIEX. O arquivo do aplicativo pode incluir nome de compostos, informações de transição de compostos e espectro da biblioteca de compostos.

1. Faça login no computador como usuário do Windows com privilégios de administrador.
2. Escolha uma das seguintes opções:
  - Se a biblioteca estiver sendo instalada a partir de um DVD, coloque o DVD na unidade e prossiga até a etapa 5.
  - Se a biblioteca estiver sendo instalada a partir de um arquivo para download, prossiga até a etapa 3.
3. Faça o download do arquivo .zip necessário pelo site da SCIEX.

**Dica!** Para evitar possíveis problemas de instalação, salve o arquivo em um local diferente da área de trabalho do computador.

---

- Depois que o download for concluído, clique com o botão direito no arquivo baixado e depois clique em **Extract All**.
  - Navegue até os arquivos extraídos ou até o DVD e, em seguida, faça clique duplo em **Library.exe**.
- 

**Dica!** Se a caixa de diálogo User Account Control abrir, clique em **Yes**.

---

**Dica!** Se a caixa de diálogo com a mensagem LibraryView Setup (Not Responding) abrir, feche-a, clique com o botão direito no arquivo **Library.exe** e selecione a opção **Run as administrator** para iniciar a instalação novamente.

---

- Clique em **Software Activation**, na caixa de diálogo LibraryViewPackages Feature Unavailable.  
A caixa de diálogo LibraryViewPackages Activation é aberta.
- Digite a chave de licença, exatamente como aparece, no campo apropriado.  
Se a chave de licença não estiver disponível, entre em contato com [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support).
- Clique em **Generate Computer ID**.  
Um identificador exclusivo é criado para a estação de trabalho.
- Clique em **Copy ID to Clipboard**.
- Siga as instruções para obter a licença.  
  
Depois que as informações necessárias forem enviadas, um arquivo de licença será enviado para todos os endereços de e-mail fornecidos.
- Feche a janela do navegador.
- Quando o e-mail com o arquivo de licença for recebido, copie-o na área de trabalho da estação de trabalho.
- Clique em **Install License File** na caixa de diálogo LibraryViewPackages Activation.
- Procure e selecione o arquivo de licença na caixa de diálogo Select the new license file to be installed.
- Clique em **Open**.  
As caixas de diálogo Select the new license file to be installed e LibraryViewPackage Activation são fechadas.
- Escolha uma das seguintes opções:
  - Clique em **All**, acima da coluna **Compound**, na caixa de diálogo Library Importer, para importar todos os compostos.
  - Clique na linha apropriada na caixa de diálogo Library Importer para importar compostos individuais.

**Dica!** Para ajudar a localizar compostos, use o campo **Search**. Conforme os critérios de pesquisa são digitados, as colunas visíveis são pesquisadas e atualizadas para mostrar apenas as informações que correspondem aos critérios especificados.

---

17. Clique em **Next**.

**Nota:** Se o usuário cancelar a importação antes de todos os compostos terem sido copiados para o banco de dados, então todos os compostos que já foram importados são mantidos no banco de dados. O software não reverte o banco de dados ao estado anterior à importação.

---

18. Resolva os conflitos necessários.

19. Clique em **Finish**.

## Conflitos de compostos

Ao instalar uma biblioteca que contenha um grupo de compostos ou instalar compostos individuais, o software verifica o banco de dados atrás de compostos com o mesmo nome ou fórmula que um composto no pacote. Se os compostos forem encontrados, o software sinaliza os compostos correspondentes no pacote e espera a ação do usuário antes de continuar.

Os usuários têm a opção de:

- Unir as informações dos compostos. Novo espectro, transições e tempos de retenção do composto no pacote são adicionados às informações de compostos armazenadas no banco de dados.
- Sobregravar as informações dos compostos. As informações de compostos do pacote substituem as informações de compostos armazenados no banco de dados.
- Siga com as informações dos compostos. As informações de compostos no banco de dados são mantidas e as informações de compostos do pacote são descartadas.

As informações conflitantes são disponibilizadas para ajudar usuários a fazer a escolha correta.

## Exibir conflitos de compostos

1. Clique em **Resolve** ao lado da na caixa de diálogo Library Importer para ver os detalhes dos conflitos.
2. Escolha uma das seguintes opções:
  - Clique em **Keep Original** para manter as informações dos compostos existentes e descartar as novas.
  - Clique em **Use New** para substituir as informações dos compostos existentes por novas.
3. Repita as etapas 1 e 2 para cada composto.
4. Depois que todos os conflitos forem resolvidos, clique em **Finish**.

### Mesclar compostos

1. Na caixa de diálogo Library Importer, realize uma das seguintes opções:
  - Clique em **Merge** para mesclar novos espectros, transições e tempos de retenção de todos os compostos individuais no pacote importado com as informações do composto correspondente armazenadas no banco de dados.
  - Clique em **Merge All** para mesclar novos espectros, transições e tempos de retenção de todos os compostos no pacote importado com as informações dos compostos correspondentes armazenados no banco de dados.
2. Depois que todos os conflitos forem resolvidos, clique em **Finish**.

### Sobrescrever compostos

1. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **Overwrite All** para sobrescrever todas as informações do composto armazenadas no banco de dados pela informação do composto correspondente do pacote importado.
  - Clique em **Resolve**, ao lado do composto apropriado, depois clique em **Use New** para sobrescrever as informações sobre compostos pelas informações correspondentes do pacote de importação.
2. Clique em **Finish** depois que todos os conflitos forem resolvidos.

### Manter compostos originais

1. Execute uma das seguintes opções na caixa de diálogo Library Importer:
  - Clique em **Keep All Original** para manter todas as informações do composto armazenadas no banco de dados e descartar as informações do composto do pacote importado.
  - Clique em **Keep Original** ao lado do composto apropriado para manter as informações sobre o composto individual armazenadas no banco de dados e descartar as informações do pacote de importação.
2. Clique em **Finish** depois que todos os conflitos forem resolvidos.

### Adicionar composto

---

**Nota:** Os compostos também podem ser adicionados a uma biblioteca usando a opção **Edit Library**.

---

1. Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
2. Clique em **All Compounds**.
3. Clique no ícone **Add**.

---

**Nota:** O nome do composto é obrigatório. Todas as outras informações são opcionais.

---

4. Digite as informações apropriadas nos campos da guia Details.
5. Clique em **Save**.

## Adicionar um espectro de massas a um composto

1. Expanda a lista **Compounds** no painel Manage.
2. Clique em **All Compounds**.
3. Clique duas vezes no composto apropriado.
4. Clique na guia **MS Spectra**.
5. Clique no ícone **Edit Mode**.
6. Clique no ícone **Add Spectra**.
7. Clique em **Open \*.wiff file**, na caixa de diálogo Add Mass Spectrum from \*.wiff file to Compound.
8. Navegue e selecione o arquivo wiff ou wiff2 adequado na caixa de seleção Open.
9. Clique em **Open**.
10. Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar os compostos a uma biblioteca:
  - Para dados IDA, expanda a amostra e selecione o composto apropriado no painel de navegação à esquerda.
  - Para EMS, MRM e dados em loop, selecione a amostra apropriada.
11. Escolha um dos seguintes procedimentos para adicionar o espectro ao composto:
  - Para dados IDA, clique em **Add Spectrum** no painel Acquired Spectrum.
  - Para EMS, MRM e dados em loop, faça clique duplo no TIC e depois clique em **Add Spectrum**, no painel Acquired Spectrum.
12. Repita as etapas 7 a 11 para cada espectro a ser adicionado.
13. Clique em **Save**.
14. Clique em **Save** na guia MS Spectra.

# Instruções de operação – Fluxos de trabalho do usuário

# 4

## Analistas

Tarefa	Consulte
Visualize a tela principal e o painel de status para verificação do status do sistema.	<a href="#">Sobre a página Início</a> e <a href="#">Sobre o Painel de status</a> .
Criar e enviar um lote usando uma planilha do Microsoft Excel ou LIMS, ou manualmente. Os métodos de LC e MS devem ser bloqueados pelos desenvolvedores do método antes de os lotes serem criados e editados pelos analistas.	<a href="#">Espaço de trabalho Batch</a> .
Visualize e controle as amostras em fila.	<a href="#">Espaço de trabalho Queue</a> .
Processar e analisar os dados nas Results Tables.	<a href="#">Espaço de trabalho Analytics</a> .
Explorar dados.	<a href="#">Espaço de trabalho Explorer</a> .

## Desenvolvedores de método

Tarefa	Consulte
Configurar o sistema.	<ul style="list-style-type: none"><li><a href="#">Instruções de operação—Configuração do dispositivo</a>.</li><li><a href="#">Defina os parâmetros de processamento padrão para o projeto</a>.</li><li><a href="#">Personalize a Results Table</a>.</li></ul>
Ajustar no espectrômetro de massas.	<a href="#">Espaço de trabalho MS Tune</a> .
Configure os dispositivos de cromatografia líquida (LC)	A documentação para o dispositivo LC.
Criar métodos de LC.	<a href="#">Criar um método de LC</a> .
Criar métodos de espectrômetro de massas (MS)	<a href="#">Espaço de trabalho MS Method</a> .



<b>Tarefa</b>	<b>Consulte</b>
Desenvolver métodos de processamento.	<a href="#">Criar métodos de processamento.</a>

## Administradores

<b>Tarefa</b>	<b>Consulte</b>
Definir as permissões de arquivo do Windows.	<i>Guia do diretor do laboratório.</i>
Configurar o LIMS.	<a href="#">Selecionar Laboratory Information Management System (LIMS) Settings.</a>
Adicione usuários ao software e atribua funções.	<i>Guia do diretor do laboratório.</i>
Arquive registros	<a href="#">Registros de arquivos.</a>

## Revisores

<b>Tarefa</b>	<b>Consulte</b>
Revise resultados processados.	<a href="#">Espaço de trabalho Analytics.</a>
Explorar dados.	<a href="#">Espaço de trabalho Explorer.</a>
Revisar os registros.	<a href="#">Visualizar os registros.</a>

# Instruções de operação – Aquisição

# 5

Use os seguintes espaços de trabalho para realizar as tarefas de aquisição:

- [Espaço de trabalho MS Method](#): crie e gerencie métodos de MS
- [Espaço de trabalho LC Method](#): crie e gerencie métodos de LC
- [Espaço de trabalho Batch](#): crie lotes e envie-os para a fila
- [Espaço de trabalho Queue](#): gerencie amostras na fila

---

**Nota:** Para evitar problemas de desempenho ou corrupção de dados, não realize procedimentos de manutenção no computador, como desfragmentação ou limpeza de disco, verificações de vírus ou atualizações do Windows, durante a aquisição da amostra.

---

## Espaço de trabalho MS Method

Use este espaço de trabalho para criar e gerenciar os métodos de espectrômetro de massas (MS).

Vários métodos podem ser abertos no espaço de trabalho MS Method. Usando o menu **Views**, o usuário pode alterar a organização das janelas do método para as visualizações tabulada, lado a lado vertical, lado a lado horizontal ou flutuante. Na visualização flutuante, as janelas podem ser redimensionadas, maximizadas ou minimizadas, movidas para fora da janela SCIEX OS e movidas para um monitor diferente.

A barra de título da janela do método contém os nomes do método e do projeto. Nas visualizações lado a lado e flutuante, a barra de título do método ativo é azul e as barras de título dos outros métodos são cinza. Na visualização tabulada, a guia para o método ativo fica branca, e as guias para os outros métodos ficam azul.

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

## Crie um método de MS

Consulte o seguinte, conforme desejado:

- [Experimentos do método de MS](#)
- [Sobre os métodos de MS](#)
- [Calcule a energia de colisão dinâmica dos métodos de MS](#)

1. Abra o espaço de trabalho do **MS Methods**.
2. Clique em **New** e depois clique em um método.
3. (Opcional) Clique em **Options** e depois selecione o seguinte, conforme desejado:

Tabela 5-1: Menu Options

Parâmetro	Descrição
<b>Apply experiment scheduling</b>	(Aplicar programação do experimento) Selecione para aplicar a janela de tempo de retenção de quando os experimentos serão executados. Para os experimentos em loop, um dos tempos de execução de início deve ser 0 e um dos tempos de execução de parada deve ser igual ao tempo de duração do método.
<b>Apply ionization scheduling</b>	(Aplicar programação de ionização) Selecione para mostrar o <b>Ionization start time</b> e o <b>Ionization stop time</b> .
<b>Show EAD parameters</b>	(Mostrar parâmetros EAD) (Sistemas ZenoTOF 7600) Selecione para mostrar os parâmetros EAD. Os seguintes campos estão habilitados quando o modo de fragmentação EAD está sendo usado e esta opção é selecionada: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Fragmentation mode: EAD</b></li> <li>• <b>Electron KE</b></li> <li>• <b>ETC</b></li> <li>• <b>Electron beam current</b></li> <li>• <b>Load time</b></li> <li>• <b>EAD RF</b></li> <li>• <b>Reaction time</b></li> </ul>
<b>Apply intact protein mode</b>	(Aplicar modo de proteína intacta) (Sistemas X500 QTOF) Selecione para mostrar os campos do modo Intact Protein.
<b>Ramp</b>	(Rampear) Selecione para rampear parâmetros. A caixa de diálogo Ramp Compound Parameters é aberta.  O rampeamento pode ser usado para otimizar parâmetros dos íons.  Rampear um parâmetro consiste em executar automaticamente um experimento enquanto se aumenta ou diminui o valor de um parâmetro. Apenas um parâmetro pode ser rampeado por vez, e as etapas devem ser na mesma direção, seja aumentando ou diminuindo nos valores de início e parada. Usuários podem ajustar as tensões de início e fim e o tamanho das etapas durante esse procedimento.  Para métodos de TOF MS, os usuários podem rampear o parâmetro DP. Para métodos TOF MSMS, os usuários podem rampear o parâmetro DP ou CE. O rampeamento pode ser habilitado ao selecionar Apply ramping to the compound parameter.

**Tabela 5-1: Menu Options (continuação)**

Parâmetro	Descrição
<b>Calibrate</b>	(Calibrar) Selecione para calibrar o espectro e o espectrômetro de massas durante a aquisição. A caixa de diálogo Calibrate é aberta. Este diálogo permite que o usuário selecione a tabela de referência iônica apropriada para calibração.  O recurso de calibração é normalmente usado com o sistema de entrega do calibrante (CDS). Para ver os resultados da calibração, os usuários podem acessar o espaço de trabalho Queue e clicar duas vezes no ícone de status de aquisição da execução da calibração. A calibração leva 1,25 min.
<b>Dynamic collision energy</b>	(Energia de colisão dinâmica) Clique para abrir a caixa de diálogo Dynamic Collision Energy.
<b>Dynamic ETC</b>	(Sistemas ZenoTOF 7600) (ETC dinâmico) Clique para abrir a caixa de diálogo Dynamic ETC.

4. Digite os valores nos campos, conforme necessário. Para obter descrições dos parâmetros, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
5. (Opcional) Clique em **Add Experiment**.

---

**Dica!** Use a lista ao lado do campo **Experiment** para alterar ou excluir o experimento.

---

6. Escolha uma das seguintes opções:
  - Clique em **Save > Lock Method** para salvar e bloquear o método de MS.
  - Clique em **Save > Save**.
  - Clique em **Save > Save as**.

## Crie um método de MRM HR usando MRM HR guiado

Use a opção **Guided** se for necessário ter mais controle sobre as tensões de início e parada.

1. Abra o espaço de trabalho MS Method.
2. Clique em **New > Guided MRM HR**.  
A página Preparation é aberta.
3. Selecione o modo:
  - **Guided**: para um maior controle sobre as tensões de início e parada.
  - **Automatic**: para permitir que o software selecione automaticamente os valores da tensão de início e parada.
4. Selecione uma **Polarity**.
5. Para usar transições conhecidas, faça o seguinte:

- a. Clique em **Use known transitions**.
  - b. Digite **Compound ID**, **Precursor Ion (Da)** e **Fragment to Use (Da)**.
6. Para usar transições desconhecidas, faça o seguinte:
- a. Clique em **Find transitions automatically**.
  - b. Digite o **Compound Name**, **Charge**, **Precursor Ion** e **Number of Fragments to Use** na tabela para cada composto.
7. Clique em **Continue**.  
A página Initial Conditions é aberta.
8. Se necessário, ajuste os **Source and Gas Parameters**.
9. Se o processamento não ocorrer automaticamente, clique em **Start**.
10. Na página Optimize DP, clique em **Ramp**.  
O software rampeia automaticamente o parâmetro DP e encontra o valor DP mais intenso para cada transição.
11. (Modo automático) Aguarde até que o DP e a CE ideais sejam identificados para cada íon produto, e a página Review Report será exibida. Em seguida, vá para a etapa 13.
12. Na página Optimize DP, clique em **Ramp**.  
O software rampeia automaticamente o parâmetro DP e encontra o valor DP mais intenso para cada transição.
13. (Opcional) Salve o relatório seguindo as etapas a seguir:
- a. Na página Report, clique em **Save report as**.
  - b. Navegue para a pasta em que o relatório será salvo, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.
14. Clique em **Continue** para abrir o método otimizado no espaço de trabalho MS Method.
15. Digite o tempo de duração do método necessário no campo **Method Duration**.
16. Realize uma das seguintes ações para salvar o método de MS:
- Clique em **Save > Save** para salvar o método no mesmo projeto com o mesmo nome.
  - Clique em **Save > Save As** para salvar o método com um novo nome ou em um projeto diferente.
  - Clique em **Save > Lock Method** para bloquear o método se ele estiver pronto para análise de rotina.

---

**Nota:** Bloqueie o método para evitar que usuários não autorizados o editem. Somente usuários com a permissão **Lock/Unlock methods** podem editar métodos bloqueados. Outros usuários podem apenas enviá-los.

---

A caixa de diálogo Save As MS Method se abrirá.

17. Digite um nome no campo **File Name**.
18. Clique em **Save**.

### Experimentos do método de MS

Use o espaço de trabalho MS Method para criar ou editar métodos de MS. Um método de MS pode conter um ou mais experimentos. Por padrão, um novo método de TOF MS contém um experimento.

Os tipos de experimentos de MS disponíveis são os seguintes:

- Três experimentos de métodos básicos: TOF MS, TOF MSMS e Q1
- Três experimentos de métodos combinados: IDA, SWATH e MRM<sup>HR</sup>

Além disso, há um procedimento passo a passo disponível para orientar a criação de um experimento de MRM<sup>HR</sup>. Depois que o procedimento for concluído, os parâmetros serão usados para preencher o método de MRM<sup>HR</sup>.

**Tabela 5-2: Experimentos de métodos básicos**

Tipo	Definição
TOF MS	Análise de massa usando TOF. Os valores de $m/z$ dos íons são retidos com base em seus tempos de voo dentro do TOF.
TOF MSMS	O íon precursor é selecionado usando o quadrupolo como um filtro de massa. Então o valor de $m/z$ dos íons de fragmento é retornado com base em seus tempos de voo do TOF MS. Este experimento é usado para determinar a estrutura dos compostos.
Q1	Uma aquisição de dados que usa o quadrupolo. A intensidade de íons é retornada para as massas no intervalo da varredura.

**Tabela 5-3: Experimentos de métodos combinados**

Tipo	Definição
IDA	Um experimento IDA (Information Dependent Acquisition) analisa dados conforme eles são adquiridos e muda as condições do experimento conforme os resultados da análise. A análise dos resultados determina as massas em que serão feitas as varreduras dependentes. O usuário tem controle total sobre os critérios que ativam um experimento IDA e os parâmetros que são ativados.
SWATH	A aquisição SWATH possibilita a análise de MS/MS de todos os íons precursores em um grande intervalo de massas em uma escala de tempo do LC. O quadrupolo Q1 é definido com uma largura de janela de seleção mais ampla (em geral de 10 Da a 50 Da) do que a usada nas aquisições convencionais de íon de produto. Ao passar por diversas janelas sequenciais de seleção, um intervalo de massa amplo é rapidamente coberto. Os espectros de massa resultantes são um composto de fragmentos de todos os íons precursores que passaram pela respectiva janela de seleção Q1. Esta técnica possibilita a análise de MS/MS não direcionada de todas as espécies em uma amostra.

**Tabela 5-3: Experimentos de métodos combinados (continuação)**

Tipo	Definição
MRM HR	O experimento MRM <sup>HR</sup> ajuda a obter dados de MS/MS de alta qualidade dos compostos com tempos de retenção e massas conhecidos. Essa aquisição também pode ser usada para extrair massas de fragmentos com larguras estreitas (0,02 Da) do espectro TOF MSMS. A extração estreita possibilita melhor seletividade.
MRM HR guiado	Um procedimento passo a passo para guiar a criação de um método de MRM <sup>HR</sup> . Depois que as etapas do procedimento forem concluídas, os parâmetros serão usados para preencher o tipo de método de MRM <sup>HR</sup> .

## Sobre os métodos de MS

O método de MS compreende os seguintes elementos:

- Parâmetros que pertencem a todo o método, incluindo parâmetros **Source and Gas**.
- Um ou mais experimentos.
  - Cada método deve conter ao menos um experimento
  - Qualquer método pode conter mais de um experimento. Isso é referido como experimentos em loop.
  - Os experimentos de TOF MS e TOF MSMS podem entrar em loop dentro de um método, atingindo até 10 experimentos. Os experimentos Q1 não podem entrar em loop.
  - Os experimentos IDA, SWATH, MRM<sup>HR</sup> podem entrar em loop dentro de um método, atingindo até 2 experimentos.

---

**Nota:** Somente combinações específicas de experimentos podem ser usadas, como IDA + IDA, IDA + MRM<sup>HR</sup>, IDA + SWATH e SWATH + MRM<sup>HR</sup>.

---

- Cada experimento tem configurações avançadas específicas.
- Varreduras individuais dentro de cada experimento

**Tabela 5-4: Recursos de espaço de trabalho de métodos MS**

Para fazer isto	Faça isto
Criar um método com mais de um experimento, ou seja, experimentos em loop.	Clique em <b>Add Experiment</b> , depois clique em um tipo de experimento.
Trocar de experimento dentro do método de MS existente.	Clique na lista ao lado de <b>Experiment</b> e clique em um tipo de experimento.

**Tabela 5-4: Recursos de espaço de trabalho de métodos MS (continuação)**

<b>Para fazer isto</b>	<b>Faça isto</b>
Converter um experimento TOF MSMS em um experimento IDA.	Clique na lista ao lado de <b>Experiment</b> e depois clique em <b>Add IDA criteria</b> .
Em um experimento MRM <sup>HR</sup> , remover o TOF MS do método.	Clique na lista ao lado de <b>Experiment</b> e depois clique em <b>Delete TOF MS (of MRM HR)</b> .. <hr/> <b>Nota:</b> Somente aplicável a experimentos em loop. <hr/>
Excluir um experimento quando há diversos experimentos dentro de um método.	Clique na lista ao lado de <b>Experiment</b> e depois clique em <b>Delete experiment</b> ..
Para visualizar as seguintes estruturas de métodos: <ul style="list-style-type: none"><li>• O número de experimentos dentro de um método.</li><li>• A duração de programação de cada experimento dentro do método.</li><li>• O número de varreduras TOF MSMS para diversos experimentos.</li></ul>	Expanda ou recolha o painel <b>Method Overview</b> do lado esquerdo do espaço de trabalho.

## Calcule a energia de colisão dinâmica dos métodos de MS

1. Abra o espaço de trabalho MS Method.
2. Crie ou abra um método de MS que contenha critérios de IDA ou critérios de aquisição do SWATH.
3. Clique em **Options > Dynamic collision energy**.
4. Modifique as informações nos campos conforme a necessidade.
5. Escolha uma das seguintes opções:
  - Para usar os valores padrão salvos anteriormente para calcular o CE dinâmico, clique em **Load Default Settings**.
  - Para salvar os valores atuais como valores padronizados a serem usados para calcular o CE dinâmico em novos métodos, clique em **Save as Default Settings**.
  - Para aplicar os valores atuais ao método atual e calcular o CE dinâmico, clique em **Apply**.



- Para fechar a caixa de diálogo e deixar as alterações de lado, clique em **Cancel**.

## Abrir um método de MS

Use o seguinte procedimento para abrir um método de MS criado com o SCIEX OS.

1. Abra o espaço de trabalho MS Method.
2. Clique em **Open**.  
A caixa de diálogo Open MS Method é aberta. Ela contém a lista e métodos de MS no projeto atual.
3. (Opcional) Se o método a ser aberto não estiver no projeto atual, selecione o projeto que contém o método a ser aberto.
4. Selecione o método de MS a ser aberto e, em seguida, clique em **Open**.

---

**Dica!** Para selecionar vários métodos, use a tecla **Shift** ou **Ctrl**.

---

## Executar um método de MS manualmente

### Procedimentos de pré-requisito

- No espaço de trabalho MS Method, crie um método de MS ou abra um método existente. Consulte a seção: [Espaço de trabalho MS Method](#) ou [Abrir um método de MS](#).

Use esse procedimento para abrir o método ativo no espaço de trabalho MS Method.

1. Clique na seta para baixo no botão **Start** no painel Data Acquisition e, em seguida, clique em um dos seguintes:
  - **Start**: esta opção executa o método de MS sem um LC.
  - **Start with LC**

Consulte a seção: [Painel Data Acquisition](#).



---

**AVISO!** Risco de incêndio. Não direcione mais de 3 mL/min de solvente para a fonte de íons. Embora os componentes de LC possam proporcionar uma vazão de até 5 mL/min, direcionar mais de 3 mL/min de solvente pode resultar no acúmulo de solvente na fonte de íons. O fluxo pode ser dividido com um T para confirmar que a vazão máxima prevista para a fonte de íons não exceda 3 mL/min.

---

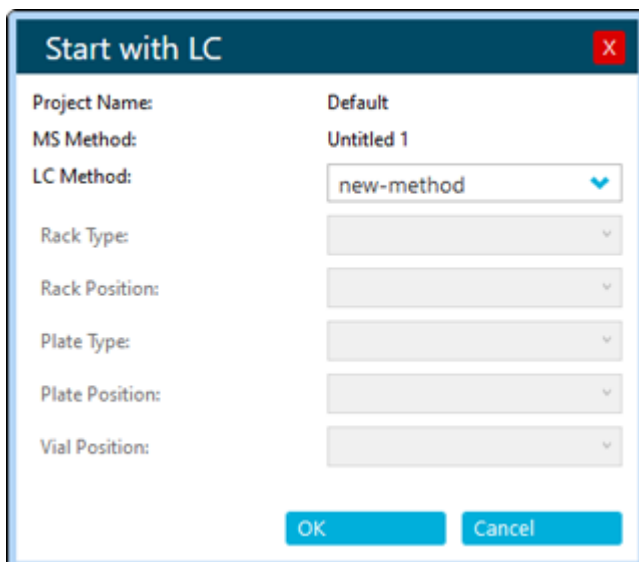
Se o usuário clicar em **Start with LC**, a caixa de diálogo Start with LC será aberta. Para obter informações os campos desta caixa de diálogo, consulte o *Sistema de ajuda*.

---

**Nota:** O sistema LC deve ser ativado e um método de LC deve ter sido criado e salvo.

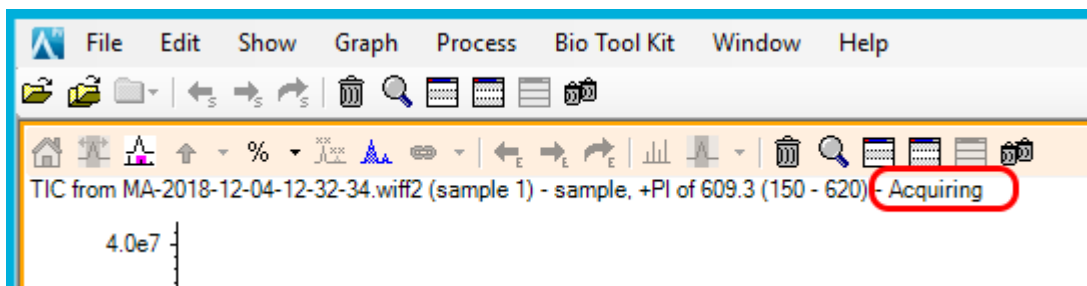
---

Figura 5-1: Caixa de diálogo Start with LC



- (Opcional) Para visualizar os dados no espaço de trabalho Explorer, clique em **Open data exploration to view real-time data** (ícone de lupa), no painel Data Acquisition. A aquisição em tempo real é indicada no painel Explore pelas palavras **Acquiring**, **Finished** ou **Aborted**, no título da amostra.

Figura 5-2: Aquisição em tempo real - Adquirindo



- (Opcional) Otimize os parâmetros de MS, conforme necessário. Para obter uma descrição dos parâmetros, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- Clique em **Stop** no painel Data Acquisition.
- (Opcional) Para salvar os dados, siga estas etapas:
  - Clique em **Save** para salvar os dados. A caixa de diálogo Save Data se abre.
  - (Opcional) Selecione o projeto e a subpasta, se aplicável, nos quais salvar os dados.
  - Digite um nome no campo **File Name**.
  - Clique em **Save**.
- Realize uma das seguintes ações para salvar o método de MS:

- Clique em **Save > Save** para salvar o método no mesmo projeto com o mesmo nome.
- Clique em **Save > Save As** para salvar o método com um novo nome ou em um projeto diferente.
- Clique em **Save > Lock Method** para bloquear o método se ele estiver pronto para análise de rotina.

---

**Nota:** Bloquee o método para evitar que usuários não autorizados o editem. Somente usuários com a permissão **Lock/Unlock methods** podem editar métodos bloqueados. Outros usuários podem apenas enviá-los.

---

A caixa de diálogo Save As MS Method se abrirá.

7. Digite um nome no campo **File Name**.
8. Clique em **Save**.

## Espaço de trabalho LC Method

Use este espaço de trabalho para criar e gerenciar métodos LC.

Vários métodos podem ser abertos no espaço de trabalho LC Method. Usando o menu **Views**, o usuário pode alterar a organização das janelas do método para as visualizações tabulada, lado a lado vertical, lado a lado horizontal ou flutuante. Na visualização flutuante, as janelas podem ser redimensionadas, maximizadas ou minimizadas, movidas para fora da janela SCIEX OS e movidas para um monitor diferente.

A barra de título da janela do método contém os nomes do método e do projeto. Nas visualizações lado a lado e flutuante, a barra de título do método ativo é azul e as barras de título dos outros métodos são cinza. Na visualização tabulada, a guia para o método ativo fica branca, e as guias para os outros métodos ficam azul.

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

## Criar um método de LC

Consulte a documentação que acompanha os dispositivos de LC.

1. Abra o espaço de trabalho LC Method.
2. Clique em **New**.
3. Clique em um dispositivo à esquerda do painel e edite os campos, conforme solicitado.
4. Salve e, opcionalmente, bloqueie o método de LC clicando em um dos seguintes comandos:
  - **Save:** para salvar o método de LC.
  - **Save > Lock Method:** para salvar e bloquear o método de LC.

A caixa de diálogo Save As LC Method se abrirá.

5. Digite um nome para o método de LC no campo **File Name** e em seguida clique em **Save**.

## Espaço de trabalho Batch

O espaço de trabalho Batch contém informações sobre um conjunto de amostras a ser adquirido e, opcionalmente, processado. Os lotes informam ao software a ordem na qual adquirir e processar as amostras.

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

---

**Nota:** Para o gerador de amostras automático selecionado, o tipo de rack, a posição do rack, o tipo da placa, a posição da placa e a posição do frasco são todos dependentes um do outro, e apenas certos valores são válidos.

---

**Tabela 5-5: Colunas do espaço de trabalho Batch**


Nome da coluna	Definição	Requisitos para valores dos campos
<b>Sample and method information</b> (Informações de amostra e método) 		
<b>Sample Name</b>	(Nome da amostra) Nome da amostra.	Menos de 252 caracteres.
<b>Sample ID</b>	(ID da amostra) Um número personalizado ou outro identificador para a amostra.	Menos de 252 caracteres. O campo <b>Sample ID</b> não pode conter nenhum desses caracteres inválidos: \ / : ; * ? " < >   =
<b>Barcode ID</b>	(ID do código de barras) ID exclusivo de uma amostra.	Menos de 250 caracteres.
<b>MS Method</b>	(Método de MS) Nome do método.	O método de MS deve existir no projeto atual. O campo não diferencia maiúsculas e minúsculas.
<b>LC Method</b>	(Método de LC) Nome do método de cromatografia líquida.	O método de LC deve existir no projeto atual. O campo não diferencia maiúsculas e minúsculas.
<b>Rack Type</b>	(Tipo de estrutura) O tipo de estrutura para o gerador de amostras automático.	Deve ser uma das opções válidas para o amostrador automático especificado no método de LC.
<b>Rack Position</b>	(Posição da estrutura) A posição da estrutura na bandeja.	Valor numérico.

Tabela 5-5: Colunas do espaço de trabalho Batch (continuação)

Nome da coluna	Definição	Requisitos para valores dos campos
<b>Plate Type</b>	<p>(Tipo de placa) O tipo de placa no gerador de amostras automático.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Esta coluna fica indisponível se o <b>Rack Type</b> descrever os frascos.</p> <hr/>	Deve ser uma das opções válidas para o amostrador automático especificado no método de LC.
<b>Plate Position</b>	(Posição da placa) A posição da placa na bandeja.	Deve associar uma das posições predefinidas da placa do gerador de amostras automático.
<b>Vial Position</b>	(Posição do frasco) (Métodos LC) A posição do frasco em uma bandeja ou uma placa.	Valor numérico. O valor máximo não deve ser superior ao número de frascos na bandeja.
<b>Injection Volume (µL)</b>	<p>(Volume da injeção (µL)) A quantidade da amostra a ser injetada.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b></p> <p>Somente para métodos de LC, o volume da injeção é tomado a partir do método de LC. O usuário pode ignorar o volume de injeção no espaço de trabalho Batch ou no arquivo do lote importado. Quando o lote é enviado, o volume de injeção é validado de acordo com o intervalo suportado pelo dispositivo de LC.</p> <p>Para reverter para o volume de injeção especificado no método de LC, exclua o conteúdo deste campo e, em seguida, selecione o método de LC novamente no campo <b>LC Method</b> .</p> <hr/>	Valor numérico.


Tabela 5-5: Colunas do espaço de trabalho Batch (continuação)

Nome da coluna	Definição	Requisitos para valores dos campos
<b>Sample Type</b>	(Tipo de amostra) O tipo de amostra.	Verifique se o tipo de amostra coincide com um dos tipos de amostra predefinidos. Tudo que não coincidir é automaticamente substituído por Unknown.
<b>Dilution Factor</b>	(Fator de diluição) O fator de diluição para amostras individuais.	Para métodos desenvolvidos pela SCIEX, o valor deve ser de 1,000000.  Deve ser um valor maior que zero e com seis casas decimais. O valor padrão é 1,000000. Não deixe o campo em branco.
<b>Data File</b>	(Arquivo de dados) O nome do arquivo onde os dados adquiridos são salvos. Inclui o caminho completo para a subpasta em que o arquivo será armazenado.	Deve ter menos do que 252 caracteres. O número total de caracteres inclui o número de caracteres no caminho da subpasta dos dados. O arquivo de dados não pode conter estes caracteres inválidos: \ / : ; * ? " < >   =  <b>Dica!</b> Clique na seta para selecionar uma subpasta em uma lista ou digite o nome de uma nova subpasta. Certifique-se de incluir uma barra invertida (\) entre a subpasta e o nome do arquivo. Se a subpasta não existir, ela será criada quando o lote for executado.

Tabela 5-5: Colunas do espaço de trabalho Batch (continuação)

Nome da coluna	Definição	Requisitos para valores dos campos
<b>Processing Method</b>	<p>(Método de processamento) Nome do método. Se um <b>Results File</b> existente for usado, deixe este campo em branco. Quando um <b>Results File</b> é selecionado, o valor <i>*Embedded Method*</i> é automaticamente mostrado neste campo.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> O método de processamento deve ser compatível com o método de MS especificado para a amostra.</p>	<p>Selecione um método de processamento na lista de métodos de processamento no projeto.</p>
<b>Results File</b>	<p>(Arquivo de resultado) O nome do arquivo com que os resultados processados são salvos. Se um <b>Results File</b> válido for especificado, os dados da amostra serão processados automaticamente após a aquisição ser concluída. Se o nome do arquivo for inválido, o processo de envio do lote não pode ser concluído.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Se um <b>Results File</b> for selecionado, o método incorporado para o arquivo Results selecionado será usado para processamento, e o texto na célula <b>Processing Method</b> será substituído por <i>*Embedded Method*</i>.</p>	<p>O arquivo de dados não pode conter estes caracteres inválidos: \ / ; : * ? " &lt; &gt;   =</p> <p>O percurso do arquivo, incluindo o nome do arquivo e as subpastas, deve ter menos de 252 caracteres.</p> <hr/> <p><b>Dica!</b> Clique na seta para selecionar um Arquivo de resultado na lista. Para criar um arquivo, digite o nome do arquivo. O arquivo será criado quando a primeira amostra no lote enviado for processada.</p>
<b>Comment</b>	(Comentário) Texto	<p>Deve ter menos do que 50 caracteres. O campo <b>Comment</b> não pode conter nenhum desses caracteres inválidos: \ / ; : * ? " &lt; &gt;   =</p>

Tabela 5-5: Colunas do espaço de trabalho Batch (continuação)

Nome da coluna	Definição	Requisitos para valores dos campos
<b>Custom columns</b>	(Personalizar colunas) (Opcional) Colunas definidas pelo usuário, em formato de texto, número inteiro ou número real.	Os requisitos dependem do formato.
<b>Component Concentrations</b> (Concentrações do componente) 		
<b>Component</b>	(Nome do componente) O nome de um componente definido no método de MS, método de processamento ou Tabela de resultados.  O lote pode conter até 4.000 linhas de componentes.	Os nomes dos componentes são retirados do método de MS, para varreduras MRM, do método de processamento ou da Tabela de resultados. O nome é validado durante a criação do método.  Os componentes também podem ser adicionados à tabela manualmente. Consulte a seção: <a href="#">Adicionar uma concentração do componente</a> .  <b>Nota:</b> Se o arquivo de importação contiver uma coluna de dados que não corresponda a nenhuma das colunas na grade do lote, a coluna será tratada como uma coluna de Compost ou de Nome do componente. Uma coluna de concentração é adicionada e preenchida com os valores dessa coluna de dados.
<b>Component concentration</b>	Concentração de analitos ou de padrão interno para os tipos de amostra padrão e de QC. A tabela contém uma coluna para cada amostra. O nome da amostra é usado como nome da coluna.	Valor numérico superior ou igual a zero.

## Gerenciar um Batch

**Nota:** Verifique se o nome do projeto correto foi selecionado no painel de status.



No espaço de trabalho Batch, use os seguintes recursos para gerenciar o lote.

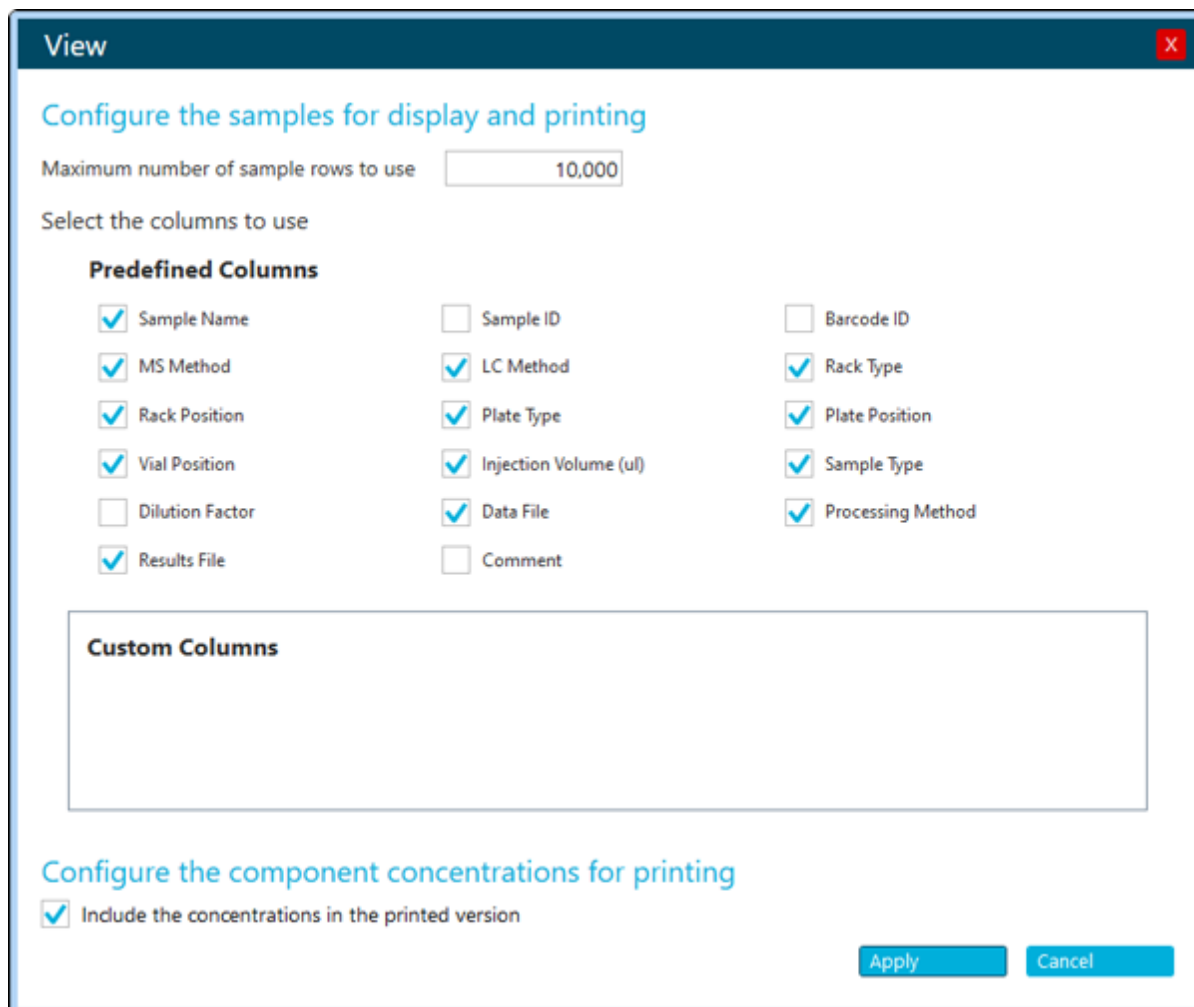
**Tabela 5-6: Recursos do espaço de trabalho Batch**

Para fazer isto	Faça isto
Mostrar ou ocultar colunas	Clique em <b>View</b> . Consulte a seção: <a href="#">Mostrar ou ocultar colunas</a> .
Recortar linhas	Clique em <b>Manage Samples &gt; Cut</b> .
Copiar linhas	Clique em <b>Manage Samples &gt; Copy</b> .
Colar linhas	Clique em <b>Manage Samples &gt; Paste</b> .
Inserir uma linha	Clique em <b>Manage Samples &gt; Insert sample</b> .
Excluir uma linha	Clique em <b>Manage Samples &gt; Delete sample</b> .
Selecionar colunas	Clique em <b>View</b> . Consulte a seção: <a href="#">Mostrar ou ocultar colunas</a> .
Adicionar uma subpasta a um projeto.	Clique em <b>Manage Samples &gt; Add data sub-folders</b> . Consulte o documento: <i>Sistema de ajuda</i> .
Imprimir o lote	Clique em <b>Print</b> .
Salve o lote no projeto atual	Clique em <b>Save &gt; Save</b> ou <b>Save &gt; Save As</b> .
Exporte o lote como arquivo txt ou csv	Clique em <b>Save &gt; Export</b> .

## Mostrar ou ocultar colunas

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Clique em **View**.
3. Marque ou desmarque as caixas de seleção das colunas, conforme solicitado, na caixa de diálogo View. Para obter descrições dos colunas, consulte tabela: [Tabela 5-5](#).

Figura 5-3: Caixa de diálogo View



4. Clique em **OK**.

## Adicionar uma coluna personalizada

Use esse procedimento para adicionar colunas ao lote para armazenar informações extra sobre a amostra, como matéria seca, de forma que possa ser usada em processamento, por exemplo, em fórmulas e colunas calculadas.

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Clique com o botão direito do mouse na grade do lote e, em seguida, clique em **Add Custom Column**.  
A caixa de diálogo Add Custom Column é aberta.
3. No campo **Column name**, digite um nome para a coluna.  
O nome deve ser único. Ele não pode ser o mesmo da coluna predefinida.
4. No campo **Column type**, selecione um dos seguintes tipos:

- **Integer:** a coluna contém números inteiros. Valores decimais serão arredondados para o número inteiro mais próximo.
  - **Real:** a coluna contém números reais, até seis casas decimais.
  - **Text:** a coluna contém texto, até 128 caracteres.
5. Clique em **Add**.  
A nova coluna é adicionada à direita do espaço de trabalho Batch.

### Alterar o nome de uma coluna personalizada

---

**Nota:** Não é possível alterar o **Column type**.

---

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Clique com o botão direito na coluna a ser alterada e, em seguida, clique em **Edit Custom Column**.  
A caixa de diálogo Edit Custom Column é aberta.
3. No campo **Name**, digite um novo nome para a coluna.  
O nome deve ser único. Ele não pode ser o mesmo da coluna predefinida.
4. Clique em **Apply**.

### Remover colunas personalizadas

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Clique com o botão direito do mouse na grade do lote e, em seguida, clique em **Delete Custom Column**.  
A caixa de diálogo Delete Custom Column é aberta.
3. Marque a caixa de seleção ao lado dos nomes das colunas a serem excluídas.
4. Clique em **Delete**.

## Importar um lote de um arquivo

### Procedimentos de pré-requisito

- Criar um arquivo de lista. Para obter uma descrição dos campos a serem incluídos no arquivo, consulte a tabela: [Tabela 5-5](#).

---

**Nota:** No arquivo do Microsoft Excel que está sendo importado, as colunas predefinidas devem vir primeiro, seguidas pelas colunas personalizadas. Os cabeçalhos das colunas para as colunas predefinidas devem corresponder aos nomes das colunas no SCIEX OS. Se os cabeçalhos das colunas para as colunas predefinidas não estiverem corretos, as informações não serão importadas. Somente um período é suportado como separador decimal em arquivos csv ou xls.

---

**Nota:** Feche o arquivo de lote antes de importá-lo. O arquivo de lote não pode ser importado se estiver aberto no Microsoft Excel.

---

- (Opcional para importar de um LIMS Watson) Para preencher automaticamente o campo **LC Method**, certifique-se de que o nome do método de LC é o mesmo do método de MS.

---

**Nota:** O LIMS Watson não possui um campo para método de LC. Se o nome do método de LC não for o mesmo do método de MS, a coluna do método de LC deve ser preenchida manualmente.

---

Revise o conteúdo do lote antes de enviar as amostras.

---

**Dica!** Para acessar os recursos recortar, copiar, colar, adicionar linhas e remover linhas, clique em **Manage Samples**.

---

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. (Opcional) Clique em **View** para selecionar as colunas que serão mostradas no espaço de trabalho Batch.
3. Clique em **Open > Import from file**.  
A caixa de diálogo Batch Import será aberta.
4. Clique em **Browse**.
5. Navegue até o arquivo solicitado.
6. Clique em **Open**.
7. (Opcional) Selecione ou desmarque a caixa de seleção **Append to current batch**, conforme solicitado.

---

**Nota:** Todos os dados existentes na grade serão sobrescritos se o usuário não selecionar a opção **Append to current batch**.

---

8. Clique em **Import**.
-

9. (Opcional) Para usar o layout da placa como referência para selecionar ou confirmar um local de amostra, clique em **Plate Layout**.  
O layout da placa do amostrador automaticamente fornece as posições da cavidade e do frasco para amostras não atribuídas.
10. Certifique-se de que a temperatura do forno de coluna seja atingida antes de enviar o lote.
11. Salvar o lote:
  - a. Clique em **Save As**.  
A caixa de diálogo Save As Batch será aberta.
  - b. Digite um **File Name** e clique em **Save**.
12. Submeta o lote. Consulte a seção: [Enviar um lote](#).

## Importar um lote de um LIMS

Procedimentos de pré-requisito
--------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Configure o LIMS no espaço de trabalho Configuration. Consulte o documento: <i>Sistema de ajuda</i>.</li></ul> |
|--|

---

**Nota:** Para importar um lote de um LIMS Watson, consulte a seção: [Importar um lote de um arquivo](#).

---

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. (Opcional) Clique em **View** para selecionar as colunas que serão mostradas no espaço de trabalho Batch.
3. Clique em **Open > Import from LIMS**.  
A caixa de diálogo Import a Batch File será aberta.
4. Digite a localização ou o nome do arquivo.
5. Digite o identificador de lote no campo **Batch Identifier**.
6. (Opcional) Selecione ou desmarque a caixa de seleção **Append to current batch**, conforme solicitado.

---

**Nota:** Todos os dados existentes na grade serão sobrescritos se o usuário não selecionar a opção **Append to current batch**.

---

7. Clique em **Import**.
8. (Opcional) Para usar o layout da placa como referência para selecionar ou confirmar um local de amostra, clique em **Plate Layout**.  
O layout da placa do amostrador automaticamente fornece as posições da cavidade e do frasco para amostras não atribuídas.
9. (Opcional) Para incluir amostras de calibração no lote, faça o seguinte:

## Instruções de operação – Aquisição

---

- a. Para abrir a caixa de diálogo Batch-Automatic Calibration Editor, clique em **Auto-Calibrate**.
  - b. Selecione os íons de referência e as configurações de fornecimento de calibrante a serem aplicadas automaticamente, na frequência especificada.
  - c. Clique em **OK**.
  - d. Marque a caixa de seleção à esquerda do botão **Auto-Calibrate**.
10. Certifique-se de que a temperatura do forno de coluna seja atingida antes de enviar o lote.
11. Salvar o lote:
- a. Clique em **Save As**.  
A caixa de diálogo Save As Batch será aberta.
  - b. Digite um **File Name** e clique em **Save**.
12. Submeta o lote. Consulte a seção: [Enviar um lote](#).

## Criar um lote manualmente

Revise o conteúdo do lote antes de enviar as amostras.

---

**Nota:** Se espectrômetro de massas está usando fechamento de contato para se comunicar com um dispositivo externo, então siga estas diretrizes:

- Certifique-se de que a sequência da amostra definida no lote corresponda a sequência definida no aparelho externo.
- Certifique-se de que a duração do método duração seja menor ou igual ao intervalo entre as injeções, conforme definido no dispositivo externo.

---

**Dica!** Para acessar os recursos recortar, copiar, colar, adicionar linhas e remover linhas, clique em **Manage Samples**.

---

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. (Opcional) Clique em **View** para selecionar as colunas que serão mostradas no espaço de trabalho Batch.

---

**Dica!** Para utilizar um lote existente, clique em **Open > Open**. (Abrir) (Abrir).

---

3. Clique em **New**.
4. (Opcional) Para usar o layout da placa como referência para selecionar ou confirmar um local de amostra, clique em **Plate Layout**.  
O layout da placa do amostrador automaticamente fornece as posições da cavidade e do frasco para amostras não atribuídas.
5. Digite a informação do lote na grade.  
Para obter uma descrição das colunas na grade, consulte a tabela: [Tabela 5-5](#).

**Dica!** O espaço de trabalho Batch oferece os seguintes recursos para facilitar a criação de lotes:

- O conteúdo de algumas células, por exemplo a célula **Sample Type**, pode ser selecionada uma lista na célula. Clique do lado direito da célula para exibir a lista.
- A segunda linha e as subsequentes adicionadas a um lote são automaticamente preenchidas com os valores da linha anterior.
- O usuário pode copiar uma única célula selecionando a célula, clicando no canto inferior direito da célula e, em seguida, arrastando para a última linha para a qual o conteúdo da célula deve ser copiado.
- O usuário pode copiar um grupo de células na mesma linha selecionando as células, clicando no canto inferior da célula mais à direita e, então, arrastando para a última linha para a qual o conteúdo da célula deve ser copiado.
- O usuário pode copiar uma série de valores digitando valores em sequência nas duas linhas, selecionando ambas as células, clicando no canto inferior direito da célula inferior e arrastando para a última linha da série.
- O usuário pode usar os comandos Copiar (**Ctrl+C**) e Colar (**Ctrl+V**) para copiar o conteúdo de uma célula ou grupo de células e, em seguida, colá-lo em um novo local.

---

**Nota:** As colunas LC não são disponibilizadas até que o método de LC seja selecionado.

---

**Dica!** Para configurar o lote que processará a amostra automaticamente após ser adquirida, use um dos seguintes métodos:

- Para usar um método de processamento incorporado, selecione um **Results File** existente. A amostra será processada com o método incorporado do arquivo de Resultados correspondente.
- Para usar um novo método de processamento, limpe o campo **Results File**. Quando o campo **Results File** for apagado, o campo **Processing Method** ficará disponível. Selecione um **Processing Method** e, em seguida, digite um novo nome do **Results File**. A amostra será processada com o método de processamento selecionado.

Ao processarem um fluxo de trabalho de análise não direcionado, uma amostra de comparação não poderá ser selecionada para processamento automático. Para métodos de processamento que usam o algoritmo AutoPeak, o software sempre constrói o modelo de integração com as amostras usadas para criar o método.

- 
6. (Opcional) Defina as concentrações do componente. Consulte a seção: [Adicionar uma concentração do componente](#)
  7. (Opcional) Para aplicar as regras de decisão ao lote, siga estes passos:
    - a. Marque a caixa de seleção **Decision Rules**.

## Instruções de operação – Aquisição

---

- b. Clique em **Decision Rules** e, em seguida, selecione **Apply** para cada regra de decisão a ser aplicada ao lote. Para adicionar regras de decisão, consulte a seção: [Adicionar uma regra de decisão](#).
- c. Clique em **Save**.

---

**Nota:** Se a opção **Decision Rules** for selecionada e pelo menos uma regra de decisão estiver ativa para um lote, **Decision Rules: Active** será exibido ao lado do nome do lote no espaço de trabalho Queue. Se o projeto ativo estiver localizado na rede e a rede estiver disponível, o texto em **Decision Rules: Disabled** será exibido.

---

8. Salvar o lote:
  - a. Clique em **Save As**.  
A caixa de diálogo Save As Batch será aberta.
  - b. Digite um **File Name** e clique em **Save**.
9. Certifique-se de que a temperatura do forno de coluna seja atingida antes de enviar o lote.
10. Certifique-se de que o sistema foi equilibrado com o método de MS e LC usado no lote.
11. Submeta o lote. Consulte a seção: [Enviar um lote](#).

## Use o recurso Plate Layout para criar um lote

O recurso de formato da placa do amostrador fornece uma representação gráfica das estruturas de bandeja e placa que podem ser usadas para preencher a grade no espaço de trabalho do Lote.

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Selecione um **MS Method**.
3. Selecione um **LC Method**.  
O sistema de LC deve estar ativo.
4. Digite o nome do **Data File** em que os dados adquiridos serão salvos.
5. Selecione o **Processing Method** que será usado para processar os dados após serem adquiridos.
6. Digite o nome do **Results File** em que os dados processados serão salvos.
7. Clique em **Plate Layout**.  
A janela Plate Layout é aberta e, por padrão, mostra uma representação gráfica da placa.
8. Defina as propriedades para a placa.  
A janela é atualizada para mostrar uma representação gráfica do tipo de placa selecionado.
9. Na representação gráfica, clique em uma posição da amostra.  
A posição da amostra selecionada é totalmente preenchida na representação gráfica. O espaço de trabalho Batch é atualizado, começando pela primeira linha que não tem a posição da amostra definida completamente, ou seja, uma linha que não inclui **Rack**



**Type**, **Plate Type** e, se poços forem utilizados, os valores de **Vial Position**. A grade mostra as posições da amostra na mesma proporção.

10. Continue para clicar nas posições da amostra conforme necessário, na representação gráfica, para preencher a grade no espaço de trabalho do Batch.

Se as posições da amostra forem digitadas na grade do espaço de trabalho Batch, a representação gráfica será atualizada da mesma forma.

---

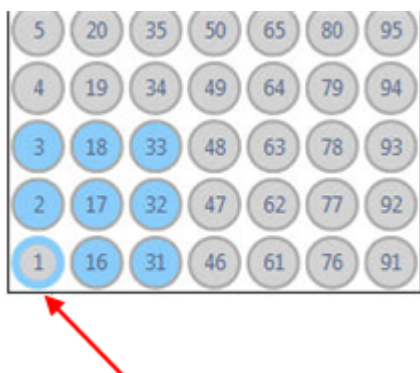
**Dica!** Para remover todos os dados associados a um tipo de bandeja especificado, clique em **Clear All**. Se o código da bandeja selecionada identificar uma placa, o menu em **Clear All** incluirá **Clear Front** e **Clear Back**.

---

11. Para especificar a posição de uma amostra selecionada de réplica, clique na posição da amostra na representação gráfica.

A representação gráfica do layout da placa mostra a posição da amostra replicada com um traço colorido, e a grade do espaço de trabalho Batch mostra os dados da mesma forma.

**Figura 5-4: Layout da placa — Posição da amostra da réplica (Posição 1)**



---

**Nota:** As posições desmarcadas são mostradas em cinza, e as posições que foram selecionadas uma vez são mostradas em azul com uma borda cinza.

---

12. Para ver o índice de amostra na representação gráfica, passe o cursor sobre a posição da amostra destacada.  
Aparece uma dica no índice da amostra.
13. Quando todas as posições forem atribuídas e revisadas, clique em **Close**, na janela Plate Layout, depois clique em **Save**, no espaço de trabalho Batch.

## Criar uma tabela de íons de referência

1. Abra o espaço de trabalho Batch.
2. Clique em **Auto-Calibrate**.  
A caixa de diálogo Batch - Automatic Calibration Editor é aberta.
3. Clique em **Edit**.  
A caixa de diálogo Ion Reference Table Editor é aberta.

## Instruções de operação – Aquisição

---

4. Clique em **New**.

---

**Dica!** Use a tecla Tab para movimentar entre as células e pressione Enter para adicionar uma linha.

---

5. Na grade **Reference Ions for TOF MS Calibration**, digite uma massa precursora. O campo **Compound Name** é opcional.
6. Adicione as linhas que desejar.
7. Na coluna **Use**, selecione os íons que serão usados.
8. Selecione o botão de opção **Use for MS/MS** para a massa precursora a ser usada para MS/MS.
9. Digite valores nos campos **CE for MS/MS** e **DP for MS/MS** para a massa precursora selecionada na etapa 8.
10. Na grade **Reference Ions for MS/MS Calibration**, adicione e depois selecione ao menos duas massas de fragmentos. O campo **Fragment Name** é opcional.
11. Clique em **OK**.
12. Digite um nome na caixa de diálogo Save Reference Table e depois clique em **OK**.

---

**Nota:** Se os usuários selecionarem um método de LC como método de injeção do calibrante, o tempo de retenção e a tolerância do tempo de retenção deverão ser especificados na tabela Reference Ions.

---

## Calibração do sistema usando o CDS

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massa estiver configurado com a opção de fechamento de contato, consulte a seção: [Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato](#).

---

1. Abra o espaço de trabalho do **Batch**.
2. Clique em **Auto-Calibrate**.  
O editor Batch - Automatic Calibration é aberto.
3. Selecione uma tabela de íons de referência.

---

**Nota:** Para os métodos TOF MSMS, certifique-se de que a massa precursora selecionada na tabela de referência é maior que a menor massa precursora no método.

---

4. Digite o número de amostras que serão adquiridas entre as calibrações.
5. Selecione **CDS** como método de injeção do calibrante.  
Por padrão, o canal 1 do CDS está selecionado. Use o canal 1 para soluções no modo positivo e o canal 2 para soluções no modo negativo.
6. Clique em **OK** para fechar a caixa de diálogo.
7. Verifique se a opção à esquerda do botão **Auto-Calibrate** está selecionada.
8. Crie e envie um lote.

---

## Calibração do sistema usando um método de LC

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massa estiver configurado com a opção de fechamento de contato, consulte a seção: [Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato](#).

---

1. Abra o espaço de trabalho do **Batch**.
2. Clique em **Auto-Calibrate**.  
O editor Batch - Automatic Calibration é aberto.
3. Selecione uma tabela de íons de referência.
4. Digite o número de amostras que serão adquiridas entre a calibração.
5. Selecione um método de LC como método de injeção do calibrante.  
Os campos referentes à bandeja do amostrador automático, placa e frasco, e também o campo do método de MS, aparecem à direita da caixa de diálogo.
6. Selecione um método de MS, depois as informações apropriadas de bandeja, placa e frasco.
7. Clique em **OK** para fechar a caixa de diálogo.
8. Verifique se a opção à esquerda do botão **Auto-Calibrate** está selecionada.
9. Crie e envie um lote.

## Gerenciar concentrações do componente


### Adicionar uma concentração do componente

O lote contém concentrações de componente definidas no método de MS, método de processamento ou Results Table. Use esse procedimento para adicionar concentrações de componente adicionais.

---

**Nota:** As concentrações de componente adicionadas usando esse procedimento são editáveis para amostras de tipo QualityControl e Standard. As concentrações do componente também são adicionadas a um lote quando o método de processamento que contiver os componentes for definido para uma amostra. As concentrações do componente adicionadas pelo método de processamento são editáveis somente para amostras com métodos de processamento que contêm o componente.

---


1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Component Concentrations** ()
2. Clique em **Manage Components > Add Component**.
3. Digite o nome do **Component**.
4. Clique em **OK**.  
A nova concentração do componente é adicionada ao lote atual.

### Excluir uma concentração do componente

Use esse procedimento para remover uma concentração de componente do lote.

## Instruções de operação – Aquisição

---

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Component Concentrations** ()
2. Clique em **Manage Components > Remove Component**.  
Uma lista dos componentes é exibida. A lista contém todos os componentes adicionados com o comando **Add Component Concentration**, ou quando um método MRM ou método de processamento foi adicionado ao lote.
3. Selecione o componente da lista.
4. Clique em **OK**.

## Gerenciar Regras de decisão

### Adicionar uma regra de decisão

Usar esse procedimento para adicionar uma regra de decisão

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique em **Add Rule**.  
A caixa de diálogo Decision Rule Configuration é aberta.
3. Digite um nome para a regra de decisão.
4. Defina as propriedades para a regra de decisão, incluindo a regra de alerta, quando a regra de decisão será avaliada, e a resposta. Consulte o documento: *Ajuda do sistema*.
5. Clique em **Save** para salvar a regra de decisão.
6. Clique em **Save** para fechar a caixa de diálogo.

---

**Nota:** Se o usuário não clicar em **Save** na caixa de diálogo Decision Rules, a nova regra de decisão não será salva.

---

### Alterar uma regra de decisão

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique no **Decision Rule Name** da regra de decisão a ser alterada.  
A caixa de diálogo Decision Rule Configuration é aberta.
3. Altere o **Decision rule name** e as configurações da regra de decisão, incluindo a regra de alerta, quando a regra de decisão será avaliada, e a resposta. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
4. Clique em **Save** para salvar a regra de decisão.
5. Clique em **Save** para fechar a caixa de diálogo.

---

**Nota:** Se o usuário não clicar em **Save** na caixa de diálogo Decision Rules, a nova regra de decisão não será salva.

---

## Excluir uma regra de decisão

Usar esse procedimento para excluir uma regra de decisão.

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique no link **Flagging Rule Used**.
3. Clique em **Delete Rule** para excluir a regra de decisão.
4. Clique em **Save**.

## Criar uma Regra duplicada

Use esse procedimento para criar uma regra duplicada.

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique na regra de decisão a ser duplicada.
3. Clique em **Duplicate Rule**.
4. Clique em **Save**.

## Importar Regras de decisão

Use esse procedimento para importar regras de decisão.

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique em **Import List**.
3. Navegue até o arquivo de texto a ser importado e selecione-o, em seguida clique em **Open**.
4. Clique em **Save**.

## Exportar Regras de decisão

1. No espaço de trabalho Batch, clique em **Decision Rules**.  
A caixa de diálogo Decision Rules é aberta.
2. Clique em **Export List**.
3. Navegue até a pasta onde o arquivo de texto será salvo, digite um nome de arquivo e, em seguida, clique em **Save**.
4. Clique em **Cancel**.

## Equilibrar o sistema

Equilibre o sistema no início do dia, antes que um novo método seja executado ou antes de submeter um lote. O equilíbrio aquece e prepara o espectrômetro de massas e o sistema de LC para a próxima amostra ou lote.

## Instruções de operação – Aquisição

---

1. Clique em **Equilibrate** no painel de status.  
A caixa de diálogo Equilibrate se abrirá.
2. Selecione um método de MS da lista **MS Method**.
3. Selecione um método de LC da lista **LC Method**.
4. Digite um tempo de equilíbrio no campo **Time (min)**, em minutos.
5. Clique em **OK**.  
Quando o equilíbrio estiver completo, o status do sistema no painel de status será Ready.

---

**Dica!** Abra o espaço de trabalho do Queue para monitorar o progresso do equilíbrio. O espaço de trabalho Queue indica quanto tempo é necessário para o equilíbrio estar completo. Para interromper o equilíbrio antes que ele termine, clique em **Stop** no espaço de trabalho Queue.

---

## Enviar um lote

Procedimentos de pré-requisito
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Equilibrar o sistema</a>.</li><li>• Abra um lote no espaço de trabalho Batch.</li></ul>



1. Clique em **Submit**.  
A caixa de diálogo Submit Samples é aberta.
2. Clique em **OK** para continuar.

---

**Nota:** Se a opção **Auto-Calibrate** estiver selecionada, e o espectrômetro de massas estiver configurado com a opção de fechamento de contato, então a primeira calibração é realizada automaticamente. Em seguida, o sistema entra no estado “Loading” até que o usuário inicie uma injeção no dispositivo externo.

---

Se os erros forem exibidos na parte superior da tela, resolva-os e, em seguida, clique novamente em **Submit**. O lote não é adicionado à fila até que todos os erros sejam resolvidos.

---

**Dica!** Se a fila não tiver sido iniciada, navegue até o espaço de trabalho Queue e, em seguida, clique em **Start** na barra de menu.

---

## Envie uma amostra única para a fila no espaço de trabalho Batch.

### Procedimentos de pré-requisito

- [Equilibrar o sistema.](#)
- Abra um lote no espaço de trabalho Batch.

1. Selecione o número indicador da linha da amostra.
2. Clique em **Submit**.  
A caixa de diálogo Submit Samples é aberta.
3. Clique em **OK** para continuar.

**Nota:** Se a opção **Auto-Calibrate** estiver selecionada, e o espectrômetro de massas estiver configurado com a opção de fechamento de contato, então a primeira calibração é realizada automaticamente. Em seguida, o sistema entra no estado “Loading” até que o usuário inicie uma injeção no dispositivo externo.

Se os erros forem exibidos na parte superior da tela, resolva-os e, em seguida, clique novamente em **Submit**. O lote não é adicionado à fila até que todos os erros sejam resolvidos.

**Dica!** Se a fila não tiver sido iniciada, navegue até o espaço de trabalho Queue e, em seguida, clique em **Start** na barra de menu.

## Envie amostras múltiplas para a fila no espaço de trabalho Batch.

### Procedimentos de pré-requisito

- [Equilibrar o sistema.](#)
- Abra um lote no espaço de trabalho Batch.

1. Escolha uma das seguintes opções:
  - Pressione **Ctrl** enquanto clica no número do índice da linha da amostra de cada amostra.
  - Arraste a lista de números do índice para cima ou para baixo.

**Nota:** As amostras são enviadas na ordem em que são selecionadas e não na ordem em que são exibidas no lote.

2. Clique em **Submit**.  
A caixa de diálogo Submit Samples é aberta.

## Instruções de operação – Aquisição

---

3. Clique em **OK** para continuar.

**Nota:** Se a opção **Auto-Calibrate** estiver selecionada, e o espectrômetro de massas estiver configurado com a opção de fechamento de contato, então a primeira calibração é realizada automaticamente. Em seguida, o sistema entra no estado “Loading” até que o usuário inicie uma injeção no dispositivo externo.

---

Se os erros forem exibidos na parte superior da tela, resolva-os e, em seguida, clique novamente em **Submit**. O lote não é adicionado à fila até que todos os erros sejam resolvidos.

---

**Dica!** Se a fila não tiver sido iniciada, navegue até o espaço de trabalho Queue e, em seguida, clique em **Start** na barra de menu.

---

## Espaço de trabalho Queue

O espaço de trabalho Queue mostra:

- Status Queue
- Status Batch
- Status de aquisição e processamento da amostra

Neste espaço de trabalho, o usuário pode gerenciar lotes e amostras na fila.

Por padrão, as amostras não são exibidas em espera. As informações sobre as amostras são minimizadas embaixo do nome do lote. O status e o nome do lote, o número de amostras no lote e o tempo restante para obter o lote atual são exibidos. A amostra de calibração incluída no lote é mostrada como Cal na fila, na coluna Sample Name.

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

---

**Nota:** Não altere manualmente a posição da válvula de desvio integrada durante a aquisição da amostra.

---

**Figura 5-5: Espaço de trabalho Queue**

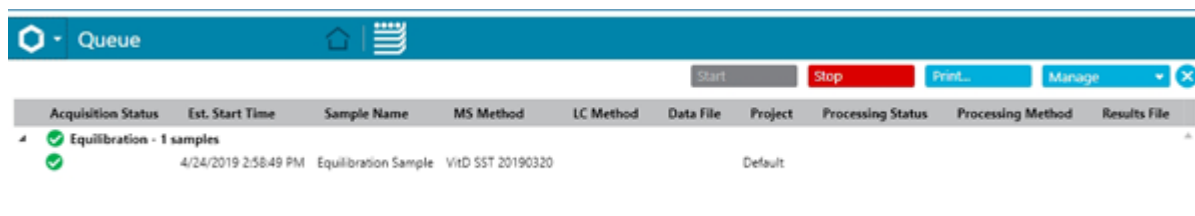




Tabela 5-7: Colunas do espaço de trabalho Queue

Rótulo	Descrição
<i>Nome do lote</i>	<p>O nome do lote que foi enviado para a fila, a quantidade de amostras do lote e o status do processamento da regra de decisão. A fila contém uma linha para cada lote. Por padrão, o lote é recolhido, mas pode ser expandido para mostrar todas as amostras no lote. Para cada amostra, as informações são mostradas nas seguintes colunas.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Para lotes com processamento de regra de decisão, o software atrasa a aquisição da próxima amostra para permitir o processamento da amostra atual a ser finalizada. Se o processamento não acabar no tempo permitido, as regras de decisão serão desabilitadas. O tempo de atraso é 1,5 vez o tempo de aquisição.</p>
<b>Acquisition Status</b>	(Status da aquisição) O status da aquisição de dados. Para obter informações sobre ícones de status, consulte a seção: <a href="#">Ícones do Queue</a> .
<b>Est. Start Time</b>	(Hora de início est.) A hora em que a aquisição desta amostra foi iniciada.
<b>Acquisition Time</b>	(Tempo de aquisição) Quanto tempo demorou para adquirir esta amostra.
<b>Sample Name</b>	(Nome da amostra) O nome da amostra, conforme especificado no lote.
<b>Sample ID</b>	(ID da amostra) O identificador da amostra, conforme especificado no lote.
<b>Barcode</b>	(Código de barras) O número do código de barras do frasco da amostra, conforme especificado no lote.
<b>Rack Code</b>	(Código do rack) O identificador do rack do LC, conforme especificado no lote.
<b>Rack Position</b>	(Posição do rack) A localização instalada do rack do LC, conforme especificado no lote.
<b>Plate Code</b>	(Código da placa) O identificador da placa do LC, conforme especificado no lote.
<b>Plate Position</b>	(Posição da placa) A localização instalada da placa do LC, conforme especificado no lote.
<b>Vial Position</b>	(Posição do frasco) A localização da amostra na placa ou no rack do LC.
<b>MS Method</b>	(Método de MS) O método de MS, conforme especificado no lote.
<b>LC Method</b>	(Método de LC) O método de LC, conforme especificado no lote.

## Instruções de operação – Aquisição

Tabela 5-7: Colunas do espaço de trabalho Queue (continuação)

Rótulo	Descrição
<b>Injection Volume</b>	(Volume da injeção) A quantidade de amostra injetada.
<b>Data File</b>	(Arquivo de dados) O nome do arquivo de dados para o qual os dados serão adquiridos.
<b>Scanned Barcode</b>	(Código de barras analisado) O identificador do frasco.
<b>User</b>	(Usuário) O nome do usuário que enviou o lote.
<b>Project</b>	(Projeto) O projeto em que o arquivo de dados será salvo.
<b>Data File Status</b>	(Status do arquivo de dados) O status do arquivo de dados.
<b>Auto Processing Status</b>	(Status do processamento automático) O status do processamento de dados. Para obter informações sobre ícones de status, consulte a seção: <a href="#">Ícones do Queue</a> .
<b>Processing Method</b>	(Método do processamento) O método de processamento que será usado para processar os dados adquiridos. Se um arquivo de Resultados estiver sendo usado, essa coluna conterá o texto <b>*Embedded Method*</b> .
<b>Results File</b>	(Arquivo de Resultados) O arquivo no qual os dados processados será gravado.
<b>Decision Rule Status</b>	(Status da regra de decisão) O estado de alerta de uma amostra e a ação realizada pela regra de decisão.
<b>Decision Rule Summary</b>	(Resumo da regra de decisão) O nome da regra de decisão que é acionada.

## Gerenciamento da Queue

A aquisição inicia após as amostras serem submetidas do espaço de trabalho do Batch. Certifique-se de que o sistema está equilibrado antes de submeter um lote. Consulte a seção: [Equilibrar o sistema](#).

**Nota:** Execute a amostra novamente se um término anormal ocorrer durante a aquisição da amostra. Se o término for causado por falta de energia, a temperatura da bandeja do amostrador automático não se mantém e a integridade da amostra pode ser comprometida.

Utilize os recursos da tabela a seguir para gerenciar as amostras e lotes na fila.

Tabela 5-8: Recursos do espaço de trabalho Queue





Para fazer isto	Faça isto
Mostrar ou ocultar colunas.	Clique em <b>Manage &gt; Display Columns</b> . Consulte a seção: <a href="#">Mostrar ou ocultar colunas</a> .
Visualizar todas as amostras no lote.	Clique em  .

Tabela 5-8: Recursos do espaço de trabalho Queue (continuação)

Para fazer isto	Faça isto
Minimizar todas as amostras no lote.	Clique em ▲.
Iniciar a aquisição.	Clique em <b>Start</b> . Equilibre o sistema antes de executar qualquer amostra.
Visualizar o status das amostras submetidas.	Clique duas vezes no cabeçalho do lote.
Readquirir as amostras selecionadas.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique nas amostras.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Reacquire samples</b>.</li> </ol>
Exclua as amostras selecionadas.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique nas amostras.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Delete samples</b>.</li> </ol>
Deletar todas as amostras abaixo da amostra selecionada.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique na amostra.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Delete samples below row selection</b>.</li> </ol>
Limpar todas as amostras ou lotes obtidos na lista.	Clique em <b>Manage &gt; Clear queue</b> .
Remova o foco de uma linha selecionada.	Clique em <b>Manage &gt; Clear all selections</b> .
Mover o lote ou amostra selecionados para a parte superior da fila.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique no cabeçalho do lote.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Move row to top</b>.</li> </ol> <p><b>Nota:</b> Somente lotes ou amostras únicas que não tenham sido obtidos podem ser movidos.</p>
Mover para cima a amostra selecionada na espera.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique na amostra.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Move row up</b>.</li> </ol> <p><b>Nota:</b> Somente amostras únicas que não tenham sido obtidos podem ser movidos.</p>
Mover para baixo a amostra selecionada na espera.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Clique na amostra.</li> <li>2. Clique em <b>Manage &gt; Move row down</b>.</li> </ol> <p><b>Nota:</b> Somente amostras únicas que não tenham sido obtidos podem ser movidos.</p>

## Instruções de operação – Aquisição

Tabela 5-8: Recursos do espaço de trabalho Queue (continuação)

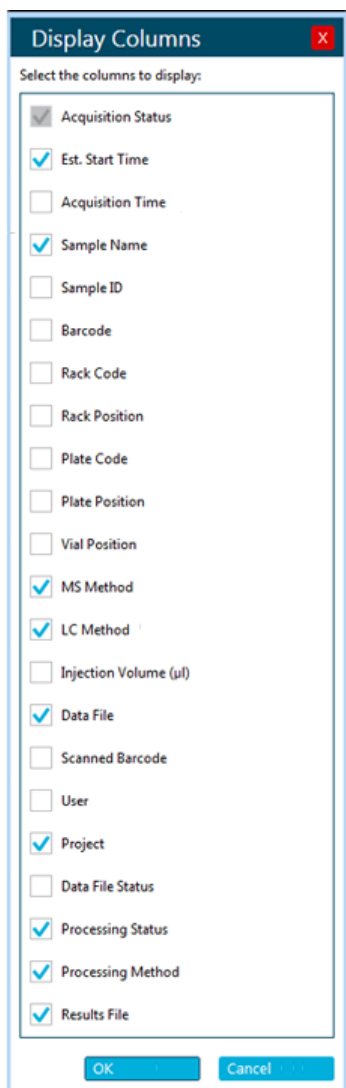
Para fazer isto	Faça isto
Minimizar todas as amostras e lotes.	Clique em <b>Manage</b> > <b>Collapse all rows</b> .
Exibir todas as amostras e lotes.	Clique em <b>Manage</b> > <b>Expand all rows</b> .
Visualizar os dados de uma amostra que estão no processo de obtenção.	Escolha uma das seguintes opções: <ul style="list-style-type: none"><li>Clique duas vezes na amostra que está no processo de obtenção.</li></ul> <hr/> <p><b>Nota:</b> Faça clique duplo em uma das colunas à esquerda da coluna <b>Processing Status</b>.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"><li>Clique em <b>Open data exploration to view real time data</b> () no painel Data Acquisition.</li></ul>
Visualizar os dados de uma amostra obtida.	Faça clique duplo na marca de verificação verde (  ) na coluna <b>Acquisition Status</b> .
Visualizar o arquivo de resultados que foi criado.	Faça clique duplo na marca de verificação verde (  ) na coluna <b>Processing Status</b> .
Visualizar os frascos do código de barras que foram escaneados.	<ol style="list-style-type: none"><li>Clique em <b>Manage</b> &gt; <b>Display Columns</b>.</li><li>Marque a caixa de seleção <b>Barcode</b> ou <b>Scanned Barcode</b>, ou ambas, na caixa de diálogo Select Columns. Consulte a seção: <a href="#">Mostrar ou ocultar colunas</a>.</li><li>Clique em <b>OK</b>.</li></ol>
Parar a fila.	<ol style="list-style-type: none"><li>Clique em <b>Stop</b>.</li><li>Selecione <b>Stop now</b> ou <b>Stop after the current tasks are completed</b>.</li><li>Clique em <b>OK</b>.</li></ol>
Interromper o processamento de todas as amostras restantes na fila.	<ol style="list-style-type: none"><li>Clique em <b>Cancel remaining processing</b>.</li><li>Clique em <b>Yes</b>.</li></ol>
Imprimir a fila.	Clique em <b>Print</b> no menu do espaço de trabalho.

## Mostrar ou ocultar colunas

- No espaço de trabalho Queue, clique em **Manage** > **Display Columns**.

2. Marque ou desmarque as caixas de seleção das colunas, conforme solicitado, na caixa de diálogo Display Columns. Para obter uma descrição dos colunas, consulte a tabela: [Tabela 5-7](#).

**Figura 5-6: Caixa de diálogo Display Columns**



3. Clique em **OK**.

## Ícones do Queue

**Tabela 5-9: Ícones do Queue**

Ícone	Name	Descrição
▶	Seta Expandir	Exibe as amostras no lote.
◀	Seta Minimizar	Ocultas as amostras no lote.

## Instruções de operação – Aquisição

Tabela 5-10: Ícones do status de aquisição












Ícone <sup>1</sup>	Name	Descrição
	<b>Completed</b>	A amostra ou o lote inteiro foi adquirido com sucesso. Faça clique duplo neste ícone para abrir a amostra no espaço de trabalho Explorer.
	<b>Warning</b>	A amostra foi adquirida, mas o usuário parou ou prolongou a aquisição.
	<b>Failed</b>	A amostra ou qualquer amostra dentro do lote não foi adquirida com sucesso.
	<b>Failed</b>	A amostra de calibração não atendeu aos critérios de aceitação. Clique duas vezes no ícone para exibir o relatório de status.
	<b>In Progress</b>	A amostra ou lote estão sendo adquiridos.
	<b>Waiting</b>	A amostra ou lote ainda não foram adquiridos ou não estão em andamento para serem adquiridos.
	<b>Barcode Warning</b>	Ocorreu um erro de leitura no código de barras ou o escaneamento do código de barras não corresponde na amostra.

Tabela 5-11: Ícones do status de processamento

Ícone <sup>2</sup>	Name	Descrição
	<b>Completed</b>	A amostra foi processada com sucesso. Faça clique duplo neste ícone para abrir o arquivo Results no espaço de trabalho Analytics.
	<b>Warning</b>	O processamento foi interrompido pelo usuário.
	<b>Failed</b>	A amostra não foi processada com sucesso.
	<b>In Progress</b>	A amostra está sendo processada.

<sup>1</sup> Se as regras de decisão forem usadas, o status da aquisição pode ser afetado pela regra de decisão. Por exemplo, a regra de decisão pode abortar uma amostra ou parar a fila. A regra de decisão leva em consideração todas as amostras no lote e, se as amostras estiverem sendo processadas em diferentes arquivos de resultado, seus arquivos de resultado associados. Mesmo as amostras que não estão mais visíveis na fila são levadas em consideração.

<sup>2</sup> Se a coluna **Processing Status** estiver vazia, nenhum método de processamento ou arquivo de Resultados foi selecionado para a amostra.

Tabela 5-11: Ícones do status de processamento (continuação)


Ícone	Name	Descrição
	Waiting	A amostra não foi processada com sucesso.

Tabela 5-12: Ícones de status da regra de decisão









Ícone <sup>3 4</sup>	Name	Descrição
	Flagging rule passed	A amostra atende aos critérios de aprovação para a regra de alerta configurada na regra de decisão.
	Flagging rule marginal	A amostra atende aos critérios marginais para a regra de alerta configurada na regra de decisão.
	Flagging rule failed	A amostra atende aos critérios de reprovação para a regra de alerta configurada na regra de decisão.
	Queue stopped	A fila é parada com base em uma regra de decisão. Este ícone também é mostrado quando a fila é parada e o próximo lote é adquirido.
	Sample injected	A amostra é reinjetada com base em uma regra de decisão ou a amostra é injetada a partir de um frasco configurado na regra de decisão.

Tabela 5-13: Ícones de status do arquivo de dados

Ícone	Name	Descrição
	Transfer Complete	A amostra foi transferida com sucesso para o projeto de rede.
	Transfer in Process	A amostra está sendo transferida para o projeto de rede.
	Transfer Failed	A transferência da amostra foi malsucedida. O SCIEX OS tentará transferir a amostra novamente.

## Espaço de trabalho MS Tune

Um arquivo dat é criado pelo software quando os dados dos instrumentos são salvos. Utilize esse arquivo para restaurar os estados de parâmetro anteriores. O arquivo de cópia de segurança dat é nomeado usando o tempo em que o arquivo foi criado, e não o tempo em que o arquivo foi salvo.

<sup>3</sup> Os ícones de estado de alerta e suas dicas de ferramenta são mostrados quando o usuário passa o cursor do mouse sobre o nome de uma regra de decisão, nome de regra de alerta e ação realizada.

<sup>4</sup> Se o usuário selecionar avaliar a regra após todos os padrões serem adquiridos, os status das amostras de alerta são atualizados retroativamente.

## Instruções de operação – Aquisição

---

**Nota:** Quando a sonda APCI estiver sendo usado, apenas as de verificação de status rápida e solução de problemas avançados estarão disponíveis. Para executar qualquer outro procedimento de ajuste, instale a sonda de ESI.

---

Sempre que o usuário carrega o procedimento MS Tune, todos os parâmetros do espectrômetro de massas são copiados.

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

## Fazer uma verificação de status rápida

Procedimentos de pré-requisito
<ul style="list-style-type: none"><li>• Certifique-se de instalar a sonda correta</li></ul>



Use este procedimento para calibrar o sistema e verificar rapidamente a resolução nos modos TOF MS e MS/MS. Se a precisão da massa de alinhamento do canal não atender à especificação, o usuário poderá repetir as etapas e calibrar o sistema. Se a resolução não atender à especificação, o usuário poderá realizar o procedimento de TOF Tuning para otimizar o sistema.

**Dica!** Os usuários podem avaliar este procedimento ao clicar em **MS Check** no painel de status.

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massas for configurado com um CDS, o software o iniciará automaticamente no começo da etapa Atingir a estabilidade da pulverização. O software interrompe o CDS quando o usuário fecha o espaço de trabalho MS Tune.

---

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **Positive Quick Status Check** ou **Negative Quick Status Check** na lista **Tuning Procedures**.
3. Clique em **Next**.
4. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
5. (Opcional) Revise o relatório para verificar os resultados de cada etapa.
6. (Opcional) Salve o relatório.
7. Clique em **Save Tuning Settings** se os resultados forem satisfatórios. Se os resultados não forem satisfatórios, realize um dos seguintes procedimentos:
  - Repita as etapas.
  - Realize o procedimento de ajuste de TOF MS. Consulte a seção: [Ajuste do TOF](#).
  - Descarte os resultados fechando o espaço de trabalho **MS Tune**.
  - Restaure as configurações anteriores selecionando o arquivo de backup apropriado no menu **Restore Instrument Data**.



## Otimizar o detector

Quando a sensibilidade do sistema estiver baixa, use este procedimento para verificar se a tensão do detector está otimizada. Durante o procedimento, o software pode ajustar a tensão do detector para fornecer a melhor sensibilidade. Quando a otimização for concluída, o usuário poderá salvar o valor otimizado ou descartar as alterações.

---

**Nota:** Certifique-se de realizar este procedimento nos modos High Mass e Low Mass.

---

Recomendamos otimizar o detector uma vez por mês. O detector também deve ser otimizado quando há uma queda significativa na sensibilidade e após a ventilação e a limpeza do instrumento.

---

**Nota:** O envelhecimento do detector é uma função de exposição a íons, por isso uma otimização mais frequente pode ser necessária quando amostras muito concentradas são usadas.

---

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massas for configurado com um CDS, o software o iniciará automaticamente no começo da etapa Atingir a estabilidade da pulverização. O software interrompe o CDS quando o usuário fecha o espaço de trabalho MS Tune.

---

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Na lista **Tuning Procedures**, realize uma das seguintes ações:
  - (Sistemas ZenoTOF) Selecione **Positive Detector Optimization** ou **Negative Detector Optimization**.
  - (Sistemas X500 QTOF) Selecione **Detector Optimization**.

A página Introduction aparece. Ela descreve a finalidade do processo de otimização, todos os pré-requisitos e as instruções.

3. Certifique-se de que a bomba da seringa está adequadamente configurada. Consulte o documento: *Guia do usuário do sistema*. Em seguida, clique em **Next**.
4. Certifique-se de que o spray está estável, em seguida clique em **Next**.
5. Siga as instruções que aparecem na tela. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*. O relatório de otimização aparece.
6. (Opcional) Salve o relatório seguindo as etapas a seguir:
  - a. Na página Report, clique em **Save report as**.
  - b. Navegue para a pasta em que o relatório será salvo, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.
7. Clique em **Next**.
8. Clique em **Save Settings**.

---

**Nota:** Se o detector otimizar a 2.650 V ou mais, entre em contato com [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support) para trocá-lo.

---

A mensagem a seguir é mostrada: "Tuning settings were saved".

### Ajustar unidade Q1

Nos experimentos MS/MS, a região do Q1 é usada para selecionar um íon precursor para fragmentação. Ajustar a Q1 Unit otimiza a largura do pico e calibra a massa em Q1. A Q1 Unit representa a largura da janela de seleção do íon precursor em resolução unitária. Q1 Low ou Q1 Open representa a largura da janela de seleção do íon precursor na resolução baixa (janela mais ampla) ou resolução aberta (janela aberta). Depois que a Q1 Unit é ajustada, as configurações de Q1 Low e Q1 Open são calculadas com base nos valores da Q1 Unit.

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massas for configurado com um CDS, o software o iniciará automaticamente no começo da etapa Atingir a estabilidade da pulverização. O software interrompe o CDS quando o usuário fecha o espaço de trabalho MS Tune.

---

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **Positive Q1 Unit Tuning** ou **Negative Q1 Unit Tuning** na lista **Tuning Procedures**.
3. Clique em **Next**.
4. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
5. (Opcional) Clique em **Edit Method** para ajustar os parâmetros.
6. Se uma calibração for realizada, clique em **Confirm** para realizar uma aquisição de confirmação.
7. Clique em **Next**.
8. (Opcional) Salve o relatório.
9. Clique em **Next**.
10. Clique em **Save Settings**.

### Ajuste do TOF

O procedimento de ajuste do TOF MS otimiza os parâmetros para resolução e sensibilidade nos modos TOF MS e MS/MS. A otimização começa verificando o desempenho do sistema antes de ajustar, depois rampeia diversos parâmetros para fins de intensidade e resolução máximas. Depois do alinhamento dos canais, o sistema é calibrado, e o desempenho do sistema, determinado. Se o desempenho for satisfatório, o usuário poderá salvar as configurações de ajuste no sistema ou descartá-las.

O ajuste de TOF MS pode ser feito no modo manual ou automático. No modo manual, o usuário seleciona os valores do parâmetro otimizado ou pausa no final das etapas de ajuste.

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massas for configurado com um CDS, o software o iniciará automaticamente no começo da etapa Atingir a estabilidade da pulverização. O software interrompe o CDS quando o usuário fecha o espaço de trabalho MS Tune.

---

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
-

- Na lista **Tuning Procedures**, realize uma das seguintes ações:
  - (Sistemas X500 QTOF) Selecione **Positive TOF MS Tuning** ou **Negative TOF MS Tuning**.
  - (Sistemas ZenoTOF) Selecione **Positive TOF Tuning** ou **Negative TOF Tuning**.
- Certifique-se de que a nebulização esteja estável.
- Clique em **Next**.
- Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- Clique em **Next**.
- (Opcional) Salve o relatório.
- Clique em **Save Settings** se os resultados forem satisfatórios. Se os resultados não forem satisfatórios, realize um dos seguintes procedimentos:
  - Repita as etapas.
  - Descarte os resultados fechando o espaço de trabalho **MS Tune**.
  - Restaure as configurações anteriores selecionando o arquivo de backup apropriado no menu **Restore Instrument Data**.
  - Entre em contato com [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support).

### Ajustar Q1 alto

Nos experimentos MS/MS, a região do Q1 é usada para selecionar um íon precursor para fragmentação. Ajuste do Q1 High otimiza a largura do pico e calibra a massa de Q1. Q1 High representa uma janela de seleção mais estreita para o íon precursor.

---

**Nota:** Se o espectrômetro de massas for configurado com um CDS, o software o iniciará automaticamente no começo da etapa Atingir a estabilidade da pulverização. O software interrompe o CDS quando o usuário fecha o espaço de trabalho MS Tune.

---

- Abra o espaço de trabalho MS Tune.
- Selecione **Positive Q1 High Tuning** ou **Negative Q1 High Tuning** na lista **Tuning Procedures**.

---

**Nota:** Se o procedimento de Q1 High positivo não tiver sido executado durante um período, clique em **Copy** para usar as configurações da unidade de Q1 positiva como ponto de partida.

---

- Certifique-se de que a nebulização esteja estável.
- Clique em **Next**.
- Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- (Opcional) Clique em **Edit Method** para ajustar os parâmetros.
- Se uma calibração for realizada, clique em **Confirm** para realizar uma aquisição de confirmação.

8. Clique em **Next**.
9. (Opcional) Salve o relatório.
10. Clique em **Next**.
11. Clique em **Save Settings**.

### Calibrar Zeno (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **Positive Zeno Calibration** ou **Negative Zeno Calibration** na lista **Tuning Procedures**.  
A página Introduction aparece. Descreve o objetivo e os pré-requisitos para o processo de calibração.
3. Certifique-se de que o spray está estável, em seguida clique em **Next**.

---

**Nota:** O usuário pode ajustar manualmente o **Source and Gas Parameters** na página Achieve Stable Spray/Modify.

---

4. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
5. Clique em **Next**.
6. (Opcional) Salve o relatório seguindo as etapas a seguir:
  - a. Na página Report, clique em **Save report as**.
  - b. Navegue para a pasta em que o relatório será salvo, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.
7. Clique em **Next**.
8. Clique em **Save Tuning Settings** se os resultados forem satisfatórios. Se os resultados não forem satisfatórios, realize um dos seguintes procedimentos:
  - Repita as etapas.
  - Descarte os resultados fechando o espaço de trabalho **MS Tune**.
  - Restaure as configurações anteriores selecionando o arquivo de backup apropriado no menu **Restore Instrument Data**.

### Realizar otimização de EAD (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **EAD Optimization** na lista **Tuning Procedures**.  
A página Introduction aparece. Descreve o objetivo e os pré-requisitos para o processo de otimização.
3. Selecione **Tuning process** e clique em **Next**.
4. Na página Filament Calibration Verification, selecione **Filament** e clique em **Calibrate Filament**.

**Dica!** Para alterar o filamento selecionado, clique na lista no campo **Filament** e, em seguida, selecione o filamento necessário.

---

5. Clique em **Next**.
  6. Certifique-se de que o spray está estável, em seguida clique em **Next**.
- 

**Nota:** O usuário pode ajustar manualmente o **Source and Gas Parameters** na página Achieve Stable Spray/Modify.

---

7. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
8. Clique em **Next**.
9. (Opcional) Salve o relatório seguindo as etapas a seguir:
  - a. Na página Report, clique em **Save report as**.
  - b. Navegue para a pasta em que o relatório será salvo, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.
10. Clique em **Next**.
11. Clique em **Save Settings**.

### Realizar redução de fundo EAD EI (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **EAD EI Background Reduction** na lista **Tuning Procedures**. A página Introduction aparece. Descreve o objetivo e os pré-requisitos do procedimento de ajuste.
3. Clique em **Next**.
4. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
5. Clique em **Next**.
6. (Opcional) Salve o relatório seguindo as etapas a seguir:
  - a. Na página Report, clique em **Save report as**.
  - b. Navegue para a pasta em que o relatório será salvo, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.

### Realizar diagnóstico de EAD (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **EAD Diagnostics** na lista **Tuning Procedures**. A página Introduction aparece. Descreve o objetivo e os pré-requisitos para o Diagnóstico de EAD.
3. Clique em **Next**.
4. Siga as instruções da tela em cada etapa. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

## Realizar inicialização de ADC (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **Tuning Procedures > ADC Initialization**.  
A página Introduction aparece. Descreve o objetivo da inicialização.
3. Clique em **Next**.  
A página ADC Initialization é exibida. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

## Solução de problemas avançados

Procedimentos de pré-requisito
<ul style="list-style-type: none"><li>• Certifique-se de instalar a sonda correta</li></ul>



Se os resultados do procedimento de ajuste não forem satisfatórios, use este procedimento de solução de problemas avançados para otimizar os parâmetros relacionados ao espectrômetro de massa. Os usuários também podem ver as estatísticas do canal TDC e os espectros durante a aquisição.

---

**Dica!** A janela Live Method pode ser usada para visualizar os parâmetros otimizados depois do ajuste.

---

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. Selecione **Advanced Troubleshooting** na lista **Tuning Procedures**.
3. Selecione um tipo de varredura.
4. Clique em **Edit Method** e edite os parâmetros na janela Live Window, se necessário.
5. Clique em **Start/Restart Method**.
6. Visualize os dados e ajuste os parâmetros conforme necessário.
7. Clique em **Stop** e salve os parâmetros do detector ou do TOF MS, conforme necessário.

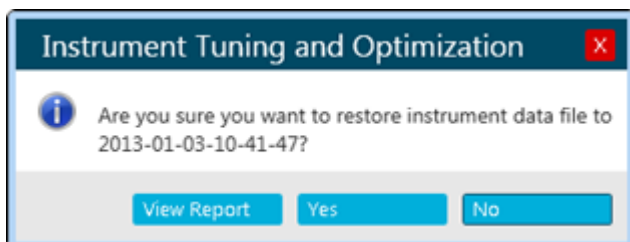
## Restaurar dados do instrumento

O software gera uma cópia do arquivo de dados do instrumento (dat) e atualiza o arquivo dat atual toda vez que o usuário salva as configurações de ajuste no final de cada procedimento de ajuste. Previamente, as configurações salvas podem ser restauradas usando a função **Restore Instrument Data**.

Toda vez que cada procedimento de ajuste for realizado, um arquivo e relatório é gerado para rastrear os resultados otimizados. Por padrão, o arquivo de dados wiff2 e o relatório podem ser encontrados em D:\SCIEX OS Data\Optimization.

1. Abra o espaço de trabalho MS Tune.
2. No menu **Restore Instrument Data**, selecione um arquivo dat com um carimbo de tempo anterior a ser restaurado.

**Figura 5-7: Caixa de diálogo Instrument Tuning and Optimization**



3. (Opcional) Visualize o relatório do arquivo dat a ser restaurado seguindo as seguintes etapas:
  - a. Clique em **View Report**.
  - b. Se um relatório tiver sido gerado para o arquivo de dados do instrumento selecionado, navegue até o arquivo do relatório e faça clique duplo nele para abri-lo.
4. Clique em **Yes**.

## Espaço de trabalho Explorer

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

### Abrir amostras

Antes de realizar as tarefas de análise de dados no espaço de trabalho Explorer, abra as amostras para analisar.

1. Abra o espaço de trabalho Explorer.
2. Para abrir uma amostra única, siga estas etapas:
  - a. Clique em **File > Open Sample**.  
A caixa de diálogo Select Sample se abre.
  - b. Navegue e, em seguida, selecione a amostra a ser aberta.
  - c. Clique em **OK**.
3. Para abrir várias amostras, siga estas etapas:
  - a. Clique em **File > Open Multiple Samples**.
  - b. Na caixa de diálogo Select Samples, selecione as amostras da lista **Available** e clique na seta para mover os arquivos para a lista **Selected**.

---

**Dica!** Para selecionar uma amostra, expanda o arquivo, clique na amostra e depois clique na seta.

---

- c. Clique em **OK**.

### Verificar presença de analito

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras</a>.</li></ul> |
|---|

1. Extrair íons. Consulte a seção: [Extrair íons](#).
2. (Opcional) Mostrar a tabela Data and Peaks. Consulte a seção: [Mostrar a tabela de Data and Peaks](#).
3. Analise a área, as intensidades, as massas e os estados de carga dos compostos do pico.



Para os sistemas SCIEX Triple Quad, alterar o estado está disponível somente para tipos de dados de varredura completa.

## Extrair íons

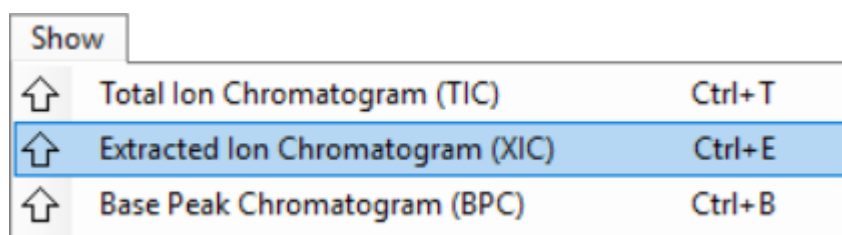
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

Usado para calcular um ou mais cromatogramas de íons extraídos sobrepostos (XICs), que é o gráfico da soma da intensidade em relação a determinado intervalo de massas como uma função do tempo de retenção.

1. Clique em **Show > Extract Ion Chromatogram (XIC)**.

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



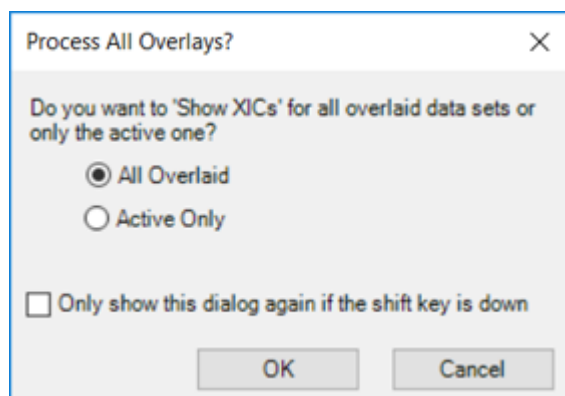
2. Se a caixa de diálogo Specify XIC Ranges for aberta, realize as seguintes etapas:
  - a. Digite os valores **Center**, **Width** e **Compound** ou importe os valores.

**Nota:** O título padrão do XIC inclui os nomes de compostos mostrados nas células de determinada linha.

**Dica!** Quando o modo **Center/Width** é usado, uma fórmula química pode ser especificada como valor de **Center**, em vez da massa. Quando uma composição neutra, como H<sub>2</sub>O, é usada, um próton é automaticamente adicionado para o modo Positivo ou subtraído para o modo Negativo. Por exemplo, a proporção *m/z* de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> é usada para o modo Positivo. Especifique um estado de carga explícita encerrando a composição com '+*n*' ou '-*n*', em que *n* é o estado da carga. Se *n* for omitido, presume-se que seja "um". Por exemplo, se H<sub>2</sub>ONa<sup>+</sup> for especificada, então a proporção *m/z* de H<sub>2</sub>ONa<sup>+</sup> é usada como tal.

- b. (Opcional) Use os recursos no menu do botão direito para personalizar as opções para a extração de íons. Para obter mais informações, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- c. Clique em **OK**.  
Se o gráfico ativo contiver séries sobrepostas das diferentes amostras, a caixa de diálogo Process All Overlays? será aberta.

**Figura 6-2: Caixa de diálogo Process All Overlays?**



3. Se a caixa de diálogo Select MRMs for aberta, selecione os MRMs a serem incluídos no XIC e, em seguida, clique em **OK**.
4. Se a caixa de diálogo Process All Overlays? a caixa de diálogo for aberta, siga as seguintes etapas:
  - a. Escolha uma das seguintes opções:
    - Selecione **All Overlaid** para gerar XICs sobrepostos para todas as amostras disponíveis.
    - Selecione **Active Only** para gerar XICs somente a partir da amostra ativa no momento.
  - b. Clique em **OK**.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.

## Abrir um Cromatograma de íons totais

Procedimentos de pré-requisito
--------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras</a>.</li></ul> |
|---|

Um cromatograma de íons totais (TIC) é criado a partir da soma das contribuições de intensidade de todos os íons em uma série de varreduras de massa. Use o TIC para exibir todo um conjunto de dados em um único painel. O TIC consiste nas intensidades somadas de todos os íons em uma varredura colocada em gráfico em função do tempo em um painel cromatográfico.

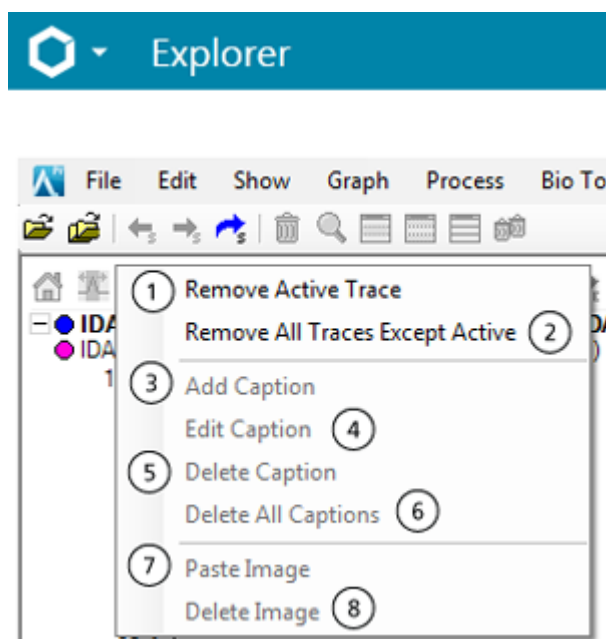
1. Clique em **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.  
Se o gráfico ativo contiver séries sobrepostas de diferentes amostras, a caixa de diálogo Process All Overlays? será aberta.
2. Se a caixa de diálogo Process All Overlays? a caixa de diálogo for aberta, siga as seguintes etapas:

- a. Escolha uma das seguintes opções:
  - Selecione **All Overlaid** para gerar TICs sobrepostos para todas as amostras disponíveis.
  - Selecione **Active Only** para gerar TICs somente a partir da amostra ativa no momento.
- b. Clique em **OK**.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.

3. Clique com o botão direito no TIC e, em seguida, use os recursos do menu do clique com o botão direito.

**Figura 6-3: Menu de contexto do cromatograma de íons totais**



Item	Descrição
1	Disponível quando há mais de um traço sobreposto. Remove do gráfico o traço ativo no momento. Para remover um traço que não está ativo, ative-o e selecione o recurso.
2	Disponível quando há mais de um traço sobreposto. Remove todos os traços, exceto o ativo no momento. Se o traço a ser mantido não estiver ativo, ative-o e selecione o recurso.

## Instruções de operação – Processamento

---

Item	Descrição
3	<p>Adiciona texto a um gráfico.</p> <p>Se necessário, clique em <b>Font</b> para ajustar as propriedades da fonte, depois clique em <b>OK</b>. A legenda é adicionada na posição (x, y), em que o usuário clicou com o botão direito para abrir o menu.</p> <p>Com a legenda adicionada, o usuário pode arrastá-la para outro local. Se o usuário arrastá-la para o eixo X ou Y, isso cancelará a operação de arrastar.</p> <p>As sequências de caracteres '\d' e '\u' são tratadas de forma especial. No primeiro caso, o primeiro caractere imediatamente subsequente aparece como subscrito e o último caso como sobrescrito. Nos dois casos, os caracteres especiais não são visíveis. Isso é particularmente útil para fórmulas químicas. Por exemplo, 'H\d\u+' aparece como <math>H_3O_3O^+</math>.</p>
4	Edita a legenda selecionada. O usuário também pode abrir esta caixa de diálogo clicando duas vezes em uma legenda.
5	Exclui a legenda selecionada. Como alternativa, arraste a legenda para fora do gráfico para excluí-la.
6	Disponível se o gráfico contiver ao menos uma legenda. Remove todas as legendas de uma vez.
7	Cola uma imagem no gráfico.
8	Exclui a imagem selecionada do gráfico.

## Abrir um Cromatograma de Pico de Base

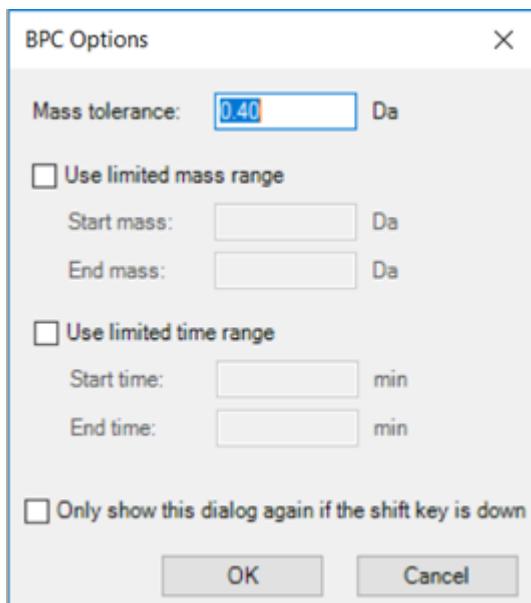
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

Gera um gráfico da intensidade do pico mais alto em cada espectro como uma função de tempo.

1. Clique em **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.

**Figura 6-4: Caixa de diálogo BPC Options**



2. Preencha os campos na caixa de diálogo BPC Options. Para obter informações sobre os campos, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

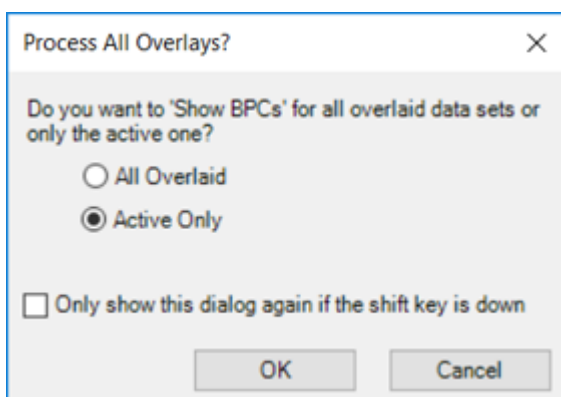
---

**Nota:** Caso um cromatograma com uma seleção única que se estende por mais de 1,0 minuto esteja ativo quando o cromatograma de pico de base for gerado, o período será padronizado conforme a seleção. Senão, o último período será usado. Com o período limitado, o usuário não precisa digitar manualmente.

---

Se o gráfico ativo contiver séries sobrepostas das diferentes amostras, a caixa de diálogo Process All Overlays? será aberta.

**Figura 6-5: Caixa de diálogo Process All Overlays?**



3. Se a caixa de diálogo Process All Overlays? a caixa de diálogo for aberta, siga as seguintes etapas:
  - a. Escolha uma das seguintes opções:

## Instruções de operação – Processamento

---

- Selecione **All Overlaid** para gerar BPCs sobrepostos para todas as amostras disponíveis.
- Selecione **Active Only** para gerar BPCs somente a partir da amostra ativa no momento.

b. Clique em **OK**.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segura a tecla **Shift** para alterar a opção.

## Mostrar a tabela de Data and Peaks

### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras](#).

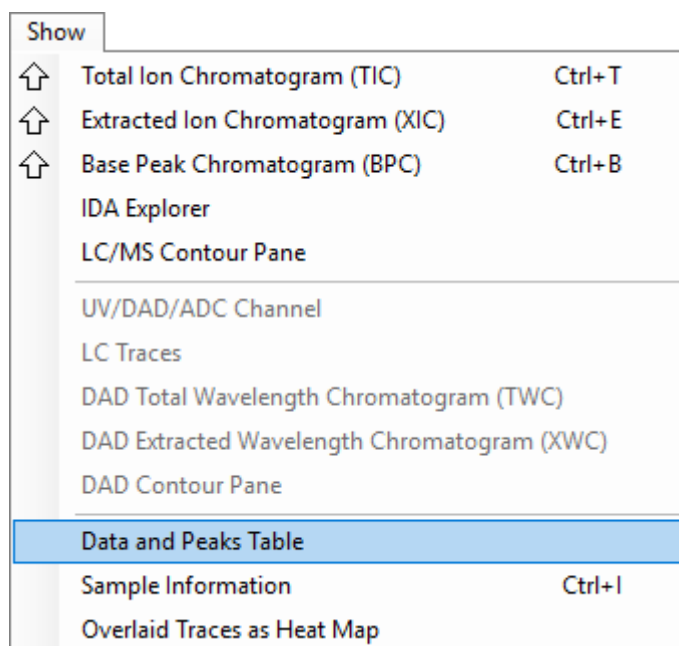
A tabela de Data and Peaks contém duas tabelas diferentes. A tabela Data mostra os valores brutos (x, y) que compreendem um conjunto de dados, e a tabela Peaks mostra informações sobre os picos. A tabela é gerada quando um gráfico está ativo.

**Nota:** Somente picos que estão acima do limite atual no gráfico, definidos com o uso da seta azul no eixo Y do gráfico, aparecem. Consulte a seção: [Trabalhar com dados em gráficos](#).

Este recurso é usado para mostrar um painel que contém duas tabelas para os dados ativos: uma tabela para os valores brutos (x, y) e uma para a lista de picos.

1. Clique em **Show > Data and Peaks Table**.

**Figura 6-6: Menu Show: tabela Data and Peaks**



2. Use os recursos da tabela a seguir.

**Tabela 6-1: Campos da tabela Data and Peaks**

Para fazer isto	Faça isto
Classificar a tabela com base nesse campo.	Clique no título da coluna.
Copiar as células selecionadas no momento.	Clique com o botão direito na tabela e depois clique em <b>Copy</b> . Se a guia Data estiver ativa, os valores de X e Y selecionados serão copiados. Se a guia Peaks estiver ativa, as informações sobre o pico serão copiadas.
Copiar somente linhas selecionadas.	Primeiro selecione as linhas arrastando o mouse na coluna do seletor de linhas usando as teclas <b>Shift</b> ou <b>Ctrl</b> para selecionar diversas linhas. Em seguida, clique com o botão direito na tabela e clique em <b>Copy</b> .
Selecionar diversas colunas.	Pressione e segure a tecla <b>Ctrl</b> e clique nos títulos das colunas. Se o usuário apenas clicar em um título da coluna, a coluna será classificada.
Copiar a tabela inteira.	Clique em <b>Edit &gt; Select All</b> , depois clique em <b>Edit &gt; Copy</b> .
Exportar dados como texto.	Clique com o botão direito no painel e depois clique em <b>Export Data as Text</b> .  Salva toda a lista de dados no arquivo especificado. Os valores X e Y são separados por uma guia, e existe um retorno manual depois de cada par (x, y).
Exportar os dados da lista de picos como texto.	Clique com o botão direito no painel e depois clique em <b>Export Peak List as Text</b> .  Salva toda a lista de picos no arquivo especificado. Não inclui picos que estejam abaixo do limite atual definido no eixo Y do gráfico associado. As métricas de picos são separadas por uma guia, e existe um retorno manual depois de cada pico.

3. Analise a área, as intensidades, as massas e os estados de carga dos compostos do pico.

## Mostrar informações da amostra

### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

O painel Sample Information exibe uma descrição textual sobre o experimento usado na aquisição de dados ativos. Essas informações incluem informações específicas da amostra,

## Instruções de operação – Processamento

---

incluindo o nome da amostra e as informações sobre a aquisição de dados, como a quantidade e o tipo dos experimentos.

Se dois ou mais painéis Sample Information, associados a amostras diferentes do mesmo arquivo de dados, estiverem visíveis, clicar em um item na exibição em árvore para qualquer um dos painéis fará com que todos os outros painéis rolem para a seção correspondente. Presume-se que as seções com os mesmos nomes existam em todos os painéis. Este recurso é útil se o usuário quiser comparar dois painéis parecidos, mas não idênticos, de Sample Information.

Clique em **Show > Sample Information**.

## Mostras informações de seleção de gráficos

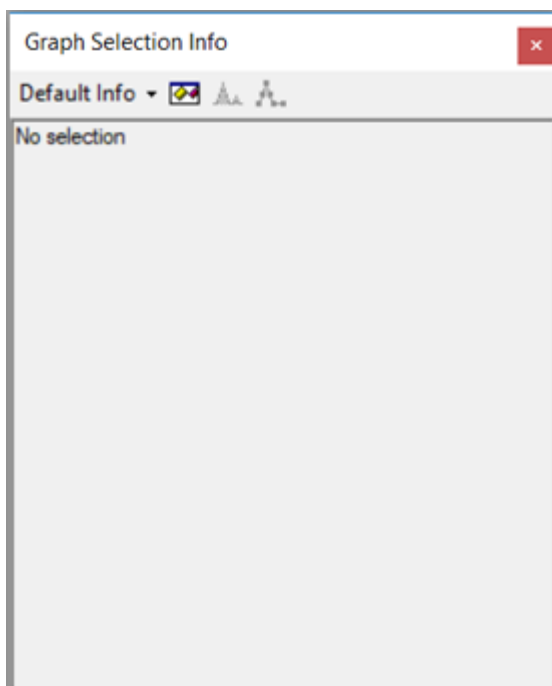
Procedimentos de pré-requisito
--------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras</a>.</li></ul> |
|---|

A caixa de diálogo Graph Selection Information mostra informações sobre a região selecionada em um cromatograma ou espectro e é gerada quando um desses painéis está ativo.

1. Clique em **Window > Graph Selection Window**.

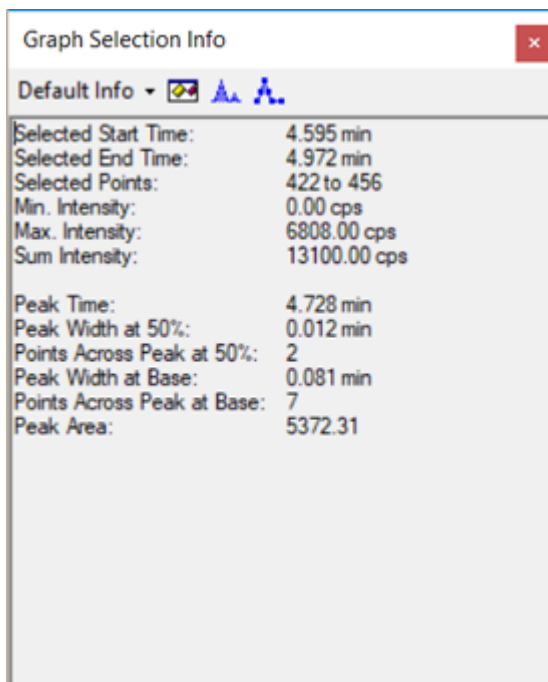
**Figura 6-7: Caixa de diálogo Graph Selection Info**



2. Faça uma ou mais seleções no cromatograma ou gráfico do espectro.

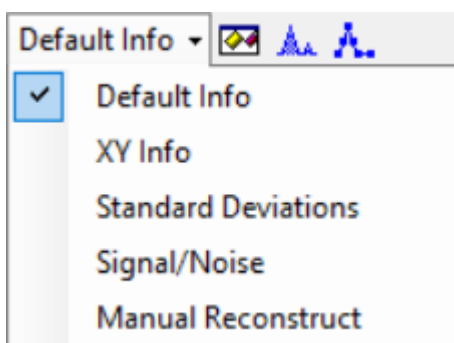


Figura 6-8: Caixa de diálogo Graph Selection Info



3. Selecione uma opção na lista: **Default Info**, **XY Info**, **Standard Deviations**, **Signal/Noise** ou **Manual Reconstruct**, se aplicável.

Figura 6-9: Opções das informações de seleção



Para obter uma descrição dos campos na caixa de diálogo, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

4. (Opcional) Calcule a proporção sinal para ruído manualmente.
  - a. Selecione um cromatograma ou, no fluxo de trabalho Mass Reconstruction, um gráfico de reconstrução.
  - b. Selecione a região de ruído e o pico de destino, usando a chave **Shift** para fazer várias seleções.
  - c. Selecione **Default Info > Signal/Noise**.

## Instruções de operação – Processamento

- (Opcional) Clique em **Options** (🔧), defina as opções das Informações do gráfico e, em seguida, clique em **OK**. Para obter uma descrição das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.  
Por exemplo, para usar 3 Sigma como multiplicador de ruído, configure **Noise multiplier for S/N** para **3**.
- (Opcional) Clique em **Fill Peaks** (📊).  
O gráfico ativo alterna entre um modo em que os picos são preenchidos com o uso de variações alternadas de escuro e claro e do modo normal. Esse recurso é útil quando o usuário deseja ver a extensão do pico que corresponde com a **Peak Width at Base**.
- (Opcional) Clique em **Show Point Symbols** (📍).  
Todos os espectros no painel ativo alternam entre um modo em que os pontos de dados são indicados com símbolos na forma de pontos e do modo normal. Esse recurso é útil quando o usuário está examinando detalhadamente um pico e quer ver quantos pontos de dados ele apresenta, em vez de usar somente as informações textuais que aparecem na janela principal.

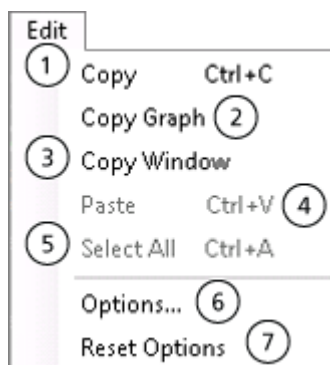
## Editar configurações em gráficos

### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras](#).

Clique em **Edit** e, em seguida, use os recursos no menu **Edit**.

Figura 6-10: Menu Edit: Options



Item	Descrição
1	Copia os dados na área de transferência. Quando há um espectro ou cromatograma ativo, uma imagem deste gráfico ativo é copiada.
2	Quando um espectro ou cromatograma estiver ativo, copie o gráfico em questão na área de transferência como uma imagem.
3	Copia uma imagem da janela ativa inteira na área de transferência. A barra de título da janela e as barras de ferramentas de seus diversos painéis não estão incluídas.

Item	Descrição
4	Cole os dados da área de transferência na visualização atual.
5	Quando há uma tabela ativa, seleciona todas as linhas na tabela. Quando há um painel de texto ativo, seleciona todo o texto.
6	Permite que o usuário defina opções para a aparência do gráfico, rotulação e localização de picos, autoprocessamento e cálculo dos intervalos de XIC. Consulte a seção: <a href="#">Definir opções</a> .
7	Restaura as opções padrão do Explorer. Consulte a seção: <a href="#">Reset Options</a> .

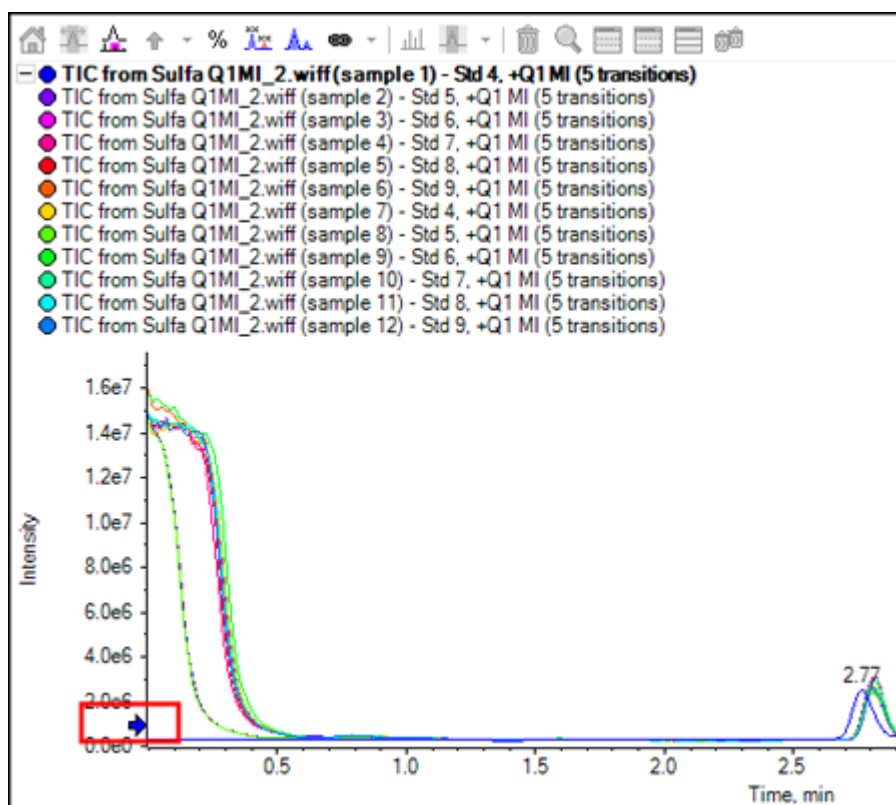
## Trabalhar com dados em gráficos

### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras](#).

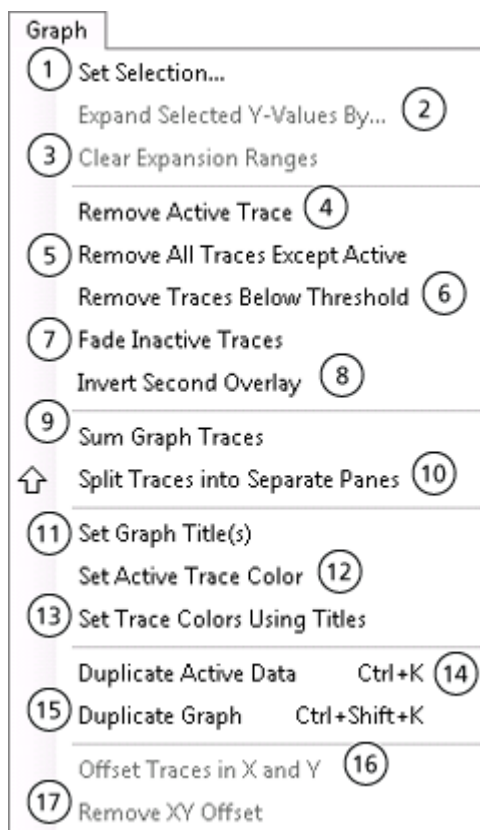
1. Para definir o limite para rotular picos e recursos subsequentes, como a tabela **Data and Peaks**, arraste a seta azul que aparece no eixo Y do gráfico.

Figura 6-11: Seta azul no eixo Y



2. Use os recursos no menu **Graph**.

**Figura 6-12: Menu Graph: Options**



Item	Descrição
1	<p>Seleciona partes dos gráficos a serem processadas nas operações subsequentes. Por exemplo, selecione uma área no cromatograma e depois clique duas vezes para obter um espectro médio. Use o recurso <b>Set Selection</b> para digitar intervalos de X específicos, de modo que as seleções possam ser definidas de forma mais precisa do que com o uso do cursor.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Clique em <b>Graph &gt; Set Selection</b>. A caixa de diálogo Set Selection é aberta.</li> <li>Digite os valores <b>Center</b> e <b>Width</b>.</li> <li>Clique em <b>OK</b>.</li> </ol> <p><b>Dica!</b> Para definir as seleções em um gráfico manualmente, arraste o cursor na região do gráfico para fazer uma seleção. Se a tecla <b>Shift</b> estiver pressionada, todas as seleções atuais serão mantidas.</p>

Item	Descrição
2	<p>Expande os valores Y dentro de um intervalo, a um fator especificado, para fins de representação gráfica.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Abra uma amostra ou várias amostras.</li> <li>Selecione uma parte do gráfico.</li> <li>Clique em <b>Graph &gt; Expand Selected Y-Values by</b>. A caixa de diálogo Expand Selection é aberta.</li> <li>Digite o fator de expansão.</li> <li>Clique em <b>OK</b>.</li> </ol>
3	<p>Remove todos os intervalos de expansão.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico com intervalos expandidos, clique em <b>Graph &gt; Clear Expansion Ranges</b>.</li> </ul>
4	<p>Remove do gráfico o traço ativo no momento. Este recurso é disponível quando há mais de um traço sobreposto.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Remove Active Trace</b>.</li> </ul>
5	<p>Remove todos os traços, exceto o ativo no momento. Este recurso é disponível quando há mais de um traço sobreposto.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Remove All Traces Except Active</b>.</li> </ul>
6	<p>Remove traços sobrepostos do gráfico para os quais todos os pontos de dados estão abaixo do limite atual.</p> <p>Se o usuário tiver ampliado o gráfico de modo que apenas parte do intervalo X fique visível, uma caixa de diálogo abrirá. O usuário pode selecionar se é necessário remover traços que estão abaixo do limite usando todo o intervalo ou apenas a parte visível atualmente.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Remove Traces Below Threshold</b>.</li> </ul>
7	<p>Quando o gráfico ativo contém mais de um traço sobreposto, desenha todos os traços, exceto o ativo, com uma cor menos intensa do que a normal. Use este recurso para se concentrar no traço ativo. Os traços inativos distraem menos a atenção. Para retornar ao estilo original, selecione novamente o recurso.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Fade Inactive Trace</b>.</li> </ul>

## Instruções de operação – Processamento

---

Item	Descrição
8	Quando um gráfico ativo contém mais de um traço sobreposto, inverte o segundo traço. Pode ficar mais fácil comparar visualmente dois traços semelhantes. Selecione <b>Invert Second Overlay</b> novamente para retornar à exibição original.
9	Substitui os gráficos por um único traço, que é a soma de todos os traços individuais. <ul style="list-style-type: none"><li>Em um gráfico ativo com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Sum Graph Traces</b>.</li></ul>
10	Cria um gráfico para cada sobreposição. Por exemplo, se o usuário começar com um gráfico que contém três traços sobrepostos e depois selecionar esse recurso, o resultado final conterá quatro painéis: o gráfico original com as sobreposições e um gráfico para cada conjunto de dados individuais. <ol style="list-style-type: none"><li>Em um gráfico ativo com mais de um traço sobreposto, clique em <b>Graph &gt; Split Traces into Separate Panes</b>. A caixa de diálogo Number of Columns é aberta.</li><li>Selecione a quantidade de colunas na saída. O número de linhas necessárias é determinado com base no número de linhas e no número de traços sobrepostos.</li><li>Marque a caixa de seleção para abrir os novos painéis em uma nova janela. Se a caixa de seleção não for marcada, os painéis serão abertos na mesma janela.</li></ol>
11	Abre a caixa de diálogo Set Titles. Use esta opção para alterar manualmente os títulos dos traços.
12	Abre a caixa de diálogo Color. Use esta opção para definir a cor do traço do gráfico ativo no momento.
13	Abre a caixa de diálogo Set Trace Colors Using Titles. Quando diversos traços de gráficos são sobrepostos, o software usa as cores padrões para as sobreposições. Use esta opção para definir cores específicas dos traços para os quais o título contém texto específico.
14	Cria uma cópia dos dados ativos do gráfico e os adiciona ao gráfico. Use esse recurso para ver o efeito de uma operação específica de processamento de dados. Por exemplo, se o usuário duplicar os dados usando esse recurso e depois suavizar um dos dois traços, o gráfico resultante conterá sobreposições antes e depois das exibições. <ul style="list-style-type: none"><li>Em um gráfico ativo, clique em <b>Graph &gt; Duplicate Active Data</b>.</li></ul>

Item	Descrição
15	<p>Cria uma cópia do gráfico ativo no momento. Use esse recurso para ver o efeito de uma operação específica de processamento de dados. Por exemplo, se o usuário duplicar os dados usando esse recurso e depois suavizar um dos dois traços, as exibições antes e depois nos dois gráficos separados aparecerão. Vincule os eixos X de forma que a ampliação de um gráfico também amplie o outro automaticamente.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Em um gráfico ativo, clique em <b>Graph &gt; Duplicate Graph</b>.</li> </ul>
16	<p>Abre a caixa de diálogo Offset Traces. Use esta opção para criar um gráfico empilhado tridimensional a partir de uma série de traços de gráfico sobrepostos.</p>
17	<p>Remove as compensações geradas do TIC.</p>

## Usar as ferramentas de operações de dois painéis

### Procedimentos de pré-requisito

- Abra o espaço de trabalho Explorer.

Use os ícones da faixa direita de painéis para fazer operações em dois painéis, o de origem e o de destino. Consulte a seção: [Tabela 6-2](#). Em todos os casos, clique no ícone do painel de origem e o arraste até o painel de destino.

**Tabela 6-2: Barra de ferramentas de dois painéis**


Ícone	Name	Descrição
	Move Pane	<p>Altera as posições relativas dos painéis. Mostrado no canto superior direito de cada painel. Clique no ícone em um painel e o arraste para a parte superior, inferior, esquerda ou direita de um segundo painel. Dependendo de onde o cursor for liberado, o primeiro painel muda a posição em relação ao segundo. Conforme o usuário arrasta o painel, um lado do segundo painel é realçado em vermelho para indicar onde o primeiro painel será colocado.</p> <p><b>Nota:</b> O usuário também pode arrastar painéis de uma janela para outra.</p>

Tabela 6-2: Barra de ferramentas de dois painéis (continuação)




Ícone	Name	Descrição
	Add Data	<p>Soma dois conjuntos de dados, ponto a ponto. Os dados do painel de origem clicado originalmente são incluídos no painel de destino, o painel sobre o qual o ícone arrastado é liberado. O título do painel modificado é atualizado para indicar que foi modificado.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> É possível adicionar ao mesmo tempo somente dois conjuntos de dados do mesmo tipo. Por exemplo, o usuário não pode adicionar um espectro a um cromatograma.</p> <hr/> <p><b>Dica!</b> Se o gráfico de destino contiver mais de um traço sobreposto, então, por padrão, os dados de origem serão adicionados somente aos dados de destino ativos. Pressione e segure a tecla <b>Ctrl</b> para adicionar o original a todos os conjuntos de dados no painel de destino.</p> <hr/>
	Subtract Data	<p>Subtrai o fundo de um espectro de massas. Parecido com o ícone <b>Add Data</b>, com a diferença de que os dados de origem são subtraídos dos dados de destino.</p> <hr/> <p><b>Dica!</b> Se o gráfico de destino contiver mais de um traço sobreposto, então, por padrão, os dados de origem serão subtraídos somente dos dados de destino ativos. Pressione e segure a tecla <b>Ctrl</b> para adicionar o original a todos os conjuntos de dados no destino.</p> <hr/> <p><b>Dica!</b> Normalmente, todos os pontos de dados para os quais a intensidade na origem é maior do que no destino não são mantidos. Ou seja, valores Y negativos são descartados. Pressione e segure a tecla <b>Shift</b> para manter os pontos com intensidade negativa.</p> <hr/>



Tabela 6-2: Barra de ferramentas de dois painéis (continuação)

Ícone	Name	Descrição
	Overlay Data	<p>Sobrepõe os dados ativos do gráfico de origem ao gráfico de destino. Depois que a operação for concluída, o gráfico de destino conterá uma nova série com uma cópia dos dados de destino.</p> <p><b>Dica!</b> Se o gráfico de origem contiver mais de um traço sobreposto, então, por padrão, somente uma cópia de seus dados ativos será movida para o gráfico de destino. Pressione e segure a tecla <b>Ctrl</b> para sobrepor uma cópia de todos os conjuntos de dados no gráfico de origem sobre o gráfico de destino.</p>

## Mover painéis e janelas

### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

Clique em **Window** e, em seguida, use os recursos no menu **Window**.

Figura 6-13: Menu Window: Options



Item	Descrição
1	Abre uma janela para exibir informações da região selecionada no gráfico ativo. Por exemplo, o intervalo X da seleção, o intervalo de intensidade dos pontos selecionados e assim por diante. Se esta janela já estiver visível, selecionar o item de menu fará com que ela feche. Consulte a seção: <a href="#">Mostras informações de seleção de gráficos.</a>
2	Altera o layout das informações na janela a partir de um formato de linha para um formato de coluna.
3	Remove o painel ativo no momento de sua janela e o coloca em uma nova janela.
4	Dispõe todas as janelas abertas que não tenham sido minimizadas de forma que elas fiquem enfileiradas ao lado uma da outra.

Item	Descrição
5	Dispõe todas as janelas abertas que não tenham sido minimizadas de forma que elas fiquem acima ou abaixo uma da outra em uma coluna.

## Realizar Suavização Gaussiana

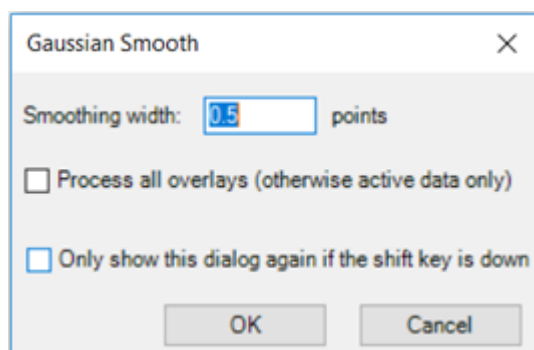
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

Aplica um algoritmo de suavização Gaussiana. Trata-se de um filtro de largura especificada em que os fatores de peso seguem uma função gaussiana ou normal.

1. Clique em **Process > Gaussian Smooth.**

**Figura 6-14: Caixa de diálogo Gaussian Smooth**



2. Digite um valor no campo **Smoothing width**.  
Esta é a largura da função Gaussiana na metade de sua altura máxima. A largura total é superior, pois o cálculo é feito nas asas da Gaussiana. Os valores fracionais são permitidos quando a meia-largura da Gaussiana é inferior a um ponto.
3. Se houver diversos traços no gráfico ativo, selecione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar a operação a todos os traços.  
Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.
4. Clique em **OK**.

## Dados de Threshold

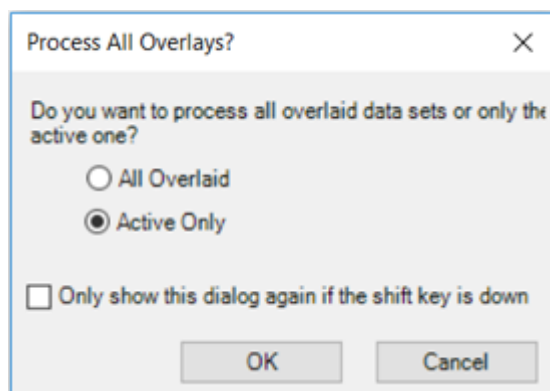
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

Remove todos os pontos de dados com intensidade abaixo da definição de referência atual. Defina o limite ao arrastar a seta azul mostrada nos eixos Y dos gráficos.

1. Clique em **Process > Threshold Data**.  
Se o gráfico ativo contiver séries sobrepostas de diferentes amostras, a caixa de diálogo Process All Overlays? será aberta.

**Figura 6-15: Caixa de diálogo Process All Overlays?**



2. Se a caixa de diálogo Process All Overlays? a caixa de diálogo for aberta, siga as seguintes etapas:
  - a. Escolha uma das seguintes opções:
    - Selecione **All Overlaid** para gerar TICs sobrepostos para todas as amostras disponíveis.
    - Selecione **Active Only** para gerar TICs somente a partir da amostra ativa no momento.
  - b. Clique em **OK**.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segura a tecla **Shift** para alterar a opção.

## Dados do subconjunto usando a seleção de gráfico

### Procedimentos de pré-requisito

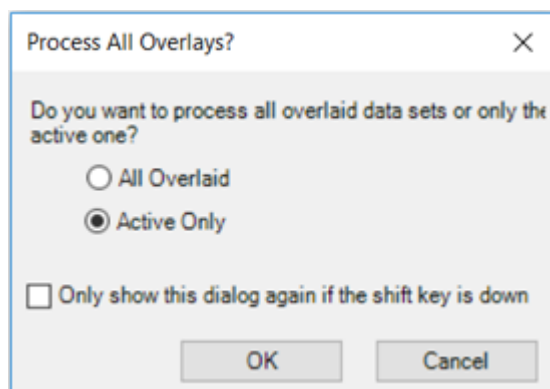
- [Abrir amostras.](#)

Este recurso só fica disponível quando um gráfico com apenas uma região selecionada fica ativo. Remove pontos de dados que residem fora da região selecionada. Use esse recurso para concentrar o processamento de dados em um subconjunto com todos os dados.

1. Faça uma seleção no gráfico.
2. Clique em **Process > Subset Data (using graph selection)**.

Se o gráfico ativo contiver séries sobrepostas de diferentes amostras, a caixa de diálogo Process All Overlays? será aberta.

**Figura 6-16: Caixa de diálogo Process All Overlays?**



3. Se a caixa de diálogo Process All Overlays? a caixa de diálogo for aberta, siga as seguintes etapas:
  - a. Escolha uma das seguintes opções:
    - Selecione **All Overlaid** para gerar XICs ou TICs sobrepostos para todas as amostras disponíveis.
    - Selecione **Active Only** para gerar XICs ou TICs somente a partir da amostra ativa no momento.
  - b. Clique em **OK**.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segura a tecla **Shift** para alterar a opção.

## Cromatograma de subtração da referência

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

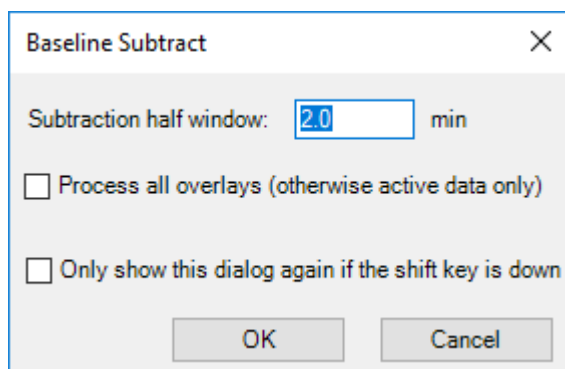
- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras.</a></li></ul> |
|---|

Remove a referência constante de um cromatograma.

Para cada ponto de dados no cromatograma, uma janela é centralizada no valor X correspondente, e os pontos com intensidade mínima na janela, à esquerda e à direita, são encontrados. Uma linha reta é ligada entre esses dois pontos, e o valor Y é calculado no centro da janela. Essa é a referência removida dos dados nesse ponto.

1. Clique em **Process > Baseline Subtract Chromatogram**.

Figura 6-17: Caixa de diálogo Baseline Subtract



2. Digite um valor, em minutos, no campo **Subtraction half window**.
3. Se houver diversos traços no gráfico ativo, selecione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar a operação a todos os traços. Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.
4. Clique em **OK**.

## Cromatograma de deslocamento

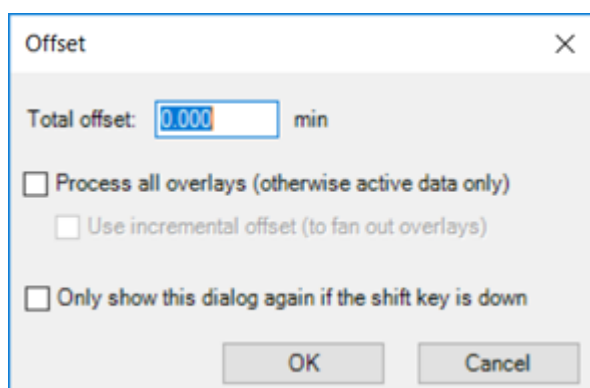
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras](#).

Usado para deslocar os valores de tempo de um cromatograma.

1. Clique em **Process > Offset Chromatogram**.

Figura 6-18: Caixa de diálogo Offset



2. Digite um valor, em minutos, no campo **Total offset**.

## Instruções de operação – Processamento

---

3. Se houver diversos traços no gráfico ativo, selecione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar a operação a todos os traços.  
Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.
4. Selecione **Use incremental offset (to fan out overlays)** para espalhar as sobreposições na direção do tempo.
5. Clique em **OK**.

## Centralizar espectro

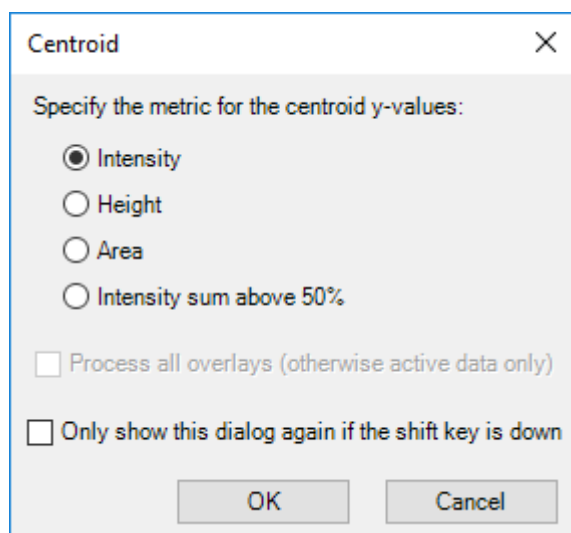
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras](#).

Cria um centroide de um espectro de massa, ou seja, substitui um espectro de perfil com pontos de massa e intensidade apenas para os picos detectados apenas.

1. Clique em **Process > Centroid Spectrum**.

**Figura 6-19: Caixa de diálogo Centroid**



2. Selecione a métrica a ser usada para o processo centroide:
  - **Intensity**: Para cada pico, o valor Y do centroide é a intensidade do maior ponto de dados que compõem o pico.
  - **Height** : esta métrica é parecida com a métrica Intensidade, exceto pelo fato de que a intensidade é subtraída pela intensidade da referência no caso de haver uma compensação para a referência.

- **Area:** para cada pico, o valor Y do centroide é a área total do pico. Trata-se de um verdadeiro integral porque o valor reportado depende tanto do perfil de intensidade quanto da largura do pico.
  - **Intensity sum above 50%:** para cada pico, o valor Y é a soma da parte das intensidades que compreendem o pico, que estão acima de 50% da intensidade máxima do pico. Este valor é útil, pois não depende somente da intensidade de um único ponto de dados, como as métricas de Intensity e Height, e não é influenciado pelas extremidades do pico, que podem ser ruidosas ou receber interferência.
3. Se houver diversos traços no gráfico ativo, selecione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar a operação a todos os traços.  
Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver marcada, a ação selecionada será sempre usada a menos que o usuário pressione e segure a tecla **Shift** para alterar a opção.
  4. Clique em **OK**.

## Exportar dados como texto

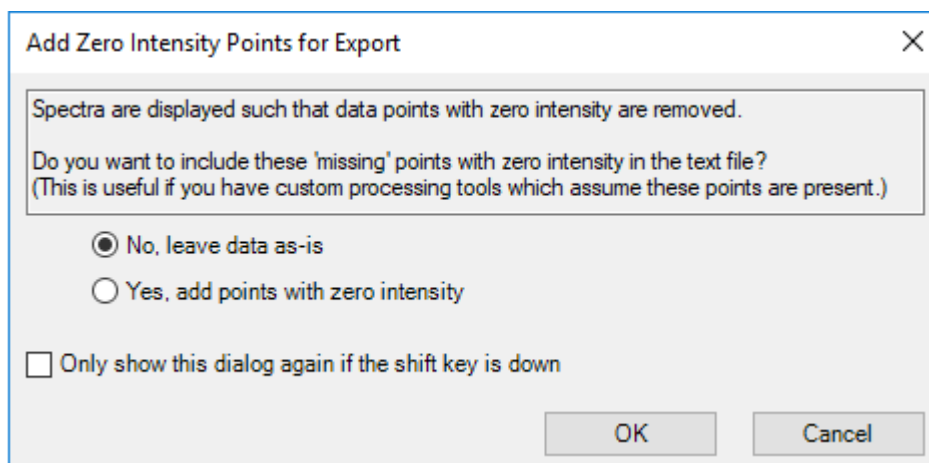
### Procedimentos de pré-requisito

- [Abrir amostras.](#)

O espectro ou cromatograma ativo é salvo como um arquivo de texto delimitado por tabulação.

1. Clique em **File > Export > Data as Text**.  
Se os dados espectrais forem exportados, a caixa de diálogo Add Zero Intensity Points for Export abrirá.

**Figura 6-20: Caixa de diálogo Add Zero Intensity Points for Export**



2. Se a caixa de diálogo Add Zero Intensity Points for Export for aberta, realize uma das seguintes ações:

## Instruções de operação – Processamento

---

- Clique em **No, leave data as-is** para excluir pontos com intensidade zero do arquivo exportado.
- Clique em **Yes, add points with zero intensity** para incluir pontos com intensidade zero no arquivo exportado.

Em seguida, clique em **OK**.

3. Digite um nome de arquivo para o arquivo exportado.
4. Clique em **Save**.

## Exportar lista de picos como texto

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras</a>.</li></ul> |
|---|

O usuário pode salvar a lista de pico do espectro ou cromatograma ativo no momento como um arquivo de texto delimitado por tabulação. Este arquivo contém informações, como o valor X do centroide (massa ou tempo), área do pico, altura etc.

1. Clique em **File > Export > Peak List as Text**.
2. Digite um nome de arquivo para o arquivo exportado.
3. Clique em **Save**.

## Imprimir dados

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Abrir amostras</a>.</li></ul> |
|---|

1. Clique em **File > Print** e selecione a opção desejada.  
A caixa de diálogo Print abrirá.
2. Selecione uma impressora e, em seguida, clique em **Print**.

## Reset Options

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Abra o espaço de trabalho Explorer.</li></ul> |
|---|

O usuário pode redefinir todas as opções no espaço de trabalho Explorer conforme os valores padronizados. Isso inclui as opções descritas na seção anterior e também as opções de processamento. Redefinir as opções afeta apenas o usuário do Windows conectado no momento, não os outros usuários no mesmo computador.

1. Clique em **Edit > Reset Options**.



Aparece uma caixa de diálogo de confirmação.

2. Clique em **OK**.

## Definir opções

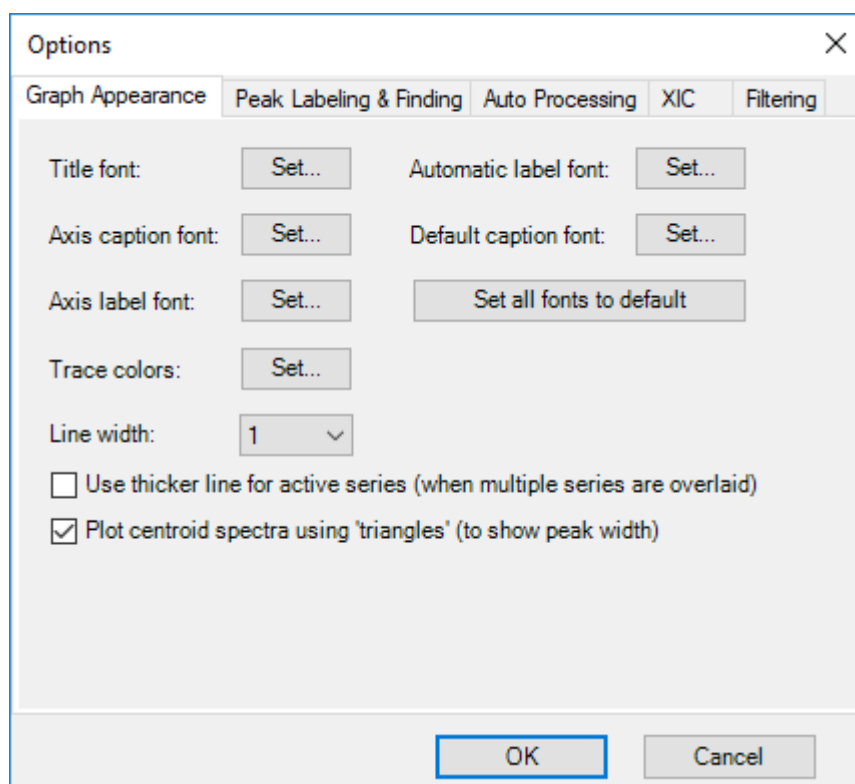
### Procedimentos de pré-requisito

- Abra o espaço de trabalho Explorer.

Use os recursos em cada guia conforme necessário.

1. Clique em **Edit > Options**.

**Figura 6-21: Caixa de diálogo Options: guia Graph Appearance**



2. Defina as opções em cada guia, conforme aplicável. Para obter descrições das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
3. Clique em **OK**.

## Espaço de trabalho Analytics

O acesso aos recursos nesse espaço de trabalho é controlado pela função designada ao usuário. Consulte o documento: *Guia do diretor do laboratório*.

## Instruções de operação – Processamento

---

**Nota:** Os meios controlados de saída de dados a partir do espaço de trabalho Analytics são: exportação de Results Tables, transferência de dados para um LIMS e geração de relatórios. As outras fontes de dados de saída, como copiar e colar das Results Tables, não são controladas. Não utilize métodos de saída não controlados para fins regulamentados.

---

O agrupamento de números não é suportado no espaço de trabalho Analytics. Não agrupe números em caixas de texto, por exemplo, nos parâmetros de integração, ou em grades como uma Results Table.

Os métodos de processamento incluem os critérios usados para quantificar os picos selecionados para integração.

Revisores devem revisar os dados de acordo com os critérios de integração do pico e aceitação dos dados nos standard operating procedures (SOPs - procedimentos de operação padrão) do laboratório.

SCIEX OS pode processar dados enquanto está sendo adquirido por SCIEX OS ou pelo software Analyst. Qualquer amostra adquirida pode ser adicionada à Results Table. Para adicionar amostras que estão sendo adquiridas, aguarde até que a aquisição seja concluída e, em seguida, adicione-as à Results Table.

## Defina os parâmetros de processamento padrão para o projeto

Essa opção ajusta os parâmetros de configuração do pico que serão usadas na criação do método de processamento. Caso haja muitos componentes, ajuste os valores padrões baseando-se na cromatografia para que eles não precisem de ajustes individuais para cada componente. No entanto, nenhum grupo de parâmetros parece ser ideal para todos os dados, portanto, pode ser necessário ter que ajustar alguns dos parâmetros individualmente para alguns dos componentes.

1. No espaço de trabalho Analytics, clique em **Projects > Project default settings**.

---

**Nota:** Verifique se o nome do projeto correto foi selecionado no painel de status.

---

A caixa de diálogo Project Default Settings se abrirá.

2. Na página Quantitative Processing, realize as seguintes etapas:
  - a. Selecione um algoritmo sinal para ruído na lista **Signal to Noise Algorithm**.
  - b. Selecione um algoritmo de integração na lista **Integration Algorithm** e, em seguida, defina os parâmetros padrão para o processamento quantitativo.

Para obter descrições dos parâmetros, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

3. Na página Qualitative Processing, selecione um algoritmo de pesquisa de biblioteca na lista **Library Search Algorithm** e, em seguida, defina os parâmetros padrão para o processamento qualitativo.

Para obter informações sobre os algoritmos, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

4. Na página Mass Reconstruction Processing, selecione um algoritmo de integração na lista **Integration Algorithm** e, em seguida, defina os parâmetros de integração padrão para reconstrução de massa.  
Para obter descrições dos parâmetros, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

---

**Nota:** Somente os algoritmos MQ4 e Summation estão disponíveis.

---

5. Clique em **Save**.
6. Clique em **Close**.

## Trabalho com Layouts do espaço de trabalho

Use o recurso de layouts do espaço de trabalho para salvar layouts do espaço de trabalho personalizados no espaço de trabalho Analytics. O layout personalizado é salvo com o arquivo Resultados e aplicado automaticamente quando o arquivo é aberto. Isso economiza o tempo dos usuários quando eles estão analisando os resultados. Um layout do espaço de trabalho salvo pode ser aplicado a outros arquivos Results. Ele também pode ser definido como layout do espaço de trabalho padrão para um projeto, que é aplicado sempre que um arquivo Results é aberto nesse projeto. Os layouts do espaço de trabalho podem ser salvos em qualquer lugar, incluindo em redes locais.

Os usuários podem alterar entre diferentes layouts salvos para realizar tipos diferentes de análise de dados em seus arquivos Results.

---

**Nota:** Todos os layouts do espaço de trabalho são salvos com a extensão do nome do arquivo qlayout.

---

---

**Nota:** Nenhuma configuração que mude ou altere os dados diretamente é preservada em um layout do espaço de trabalho.

---

A tabela a seguir lista os elementos de IU que são salvos com os layouts do espaço de trabalho.

Tabela 6-3: Elementos de IU salvos com os layouts do espaço de trabalho

Painel	Elementos de IU salvos
Results Table	<ul style="list-style-type: none"> <li>• A caixa de seleção <b>Qualify for Rules Filters</b>.</li> <li>• Qualificação dos filtros de linha.</li> <li>• Escolha da organização da tabela.</li> <li>• Linhas e colunas destacadas.</li> <li>• <b>Table display settings</b>.</li> <li>• Filtros de coluna.</li> </ul> <hr/> <p><b>Nota:</b> Quando o layout do espaço de trabalho é aplicado a uma Results Table diferente, as configurações de filtro de coluna são aplicadas, se possível. Se uma coluna filtrada não existe em uma Results Table, ou se uma opção de filtragem não for aplicável, a configuração não será aplicada.</p>
Menu Views	<ul style="list-style-type: none"> <li>• A configuração <b>Show hidden pane</b>.</li> <li>• Se a opção <b>Tabbed view</b> for selecionada.</li> </ul>
Samples ou Components and Groups	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se a lista Samples ou Components and Groups for aberta.</li> <li>• Se amostras ou componentes específicos forem selecionados para serem mostrados em uma Results Table.</li> <li>• Na lista Samples, a configuração para <b>Options &gt; Synchronize Sample Selection</b>.</li> <li>• Na lista Components and Groups, seleção das opções <b>All Internal Standards, All Analytes, All Components e Groups (where applicable)</b>.</li> <li>• Na lista Components and Groups, a configuração para <b>Options &gt; Show IS</b></li> </ul>
Peak Review	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se o painel Peak Review está aberto e encaixado.</li> <li>• A <b>View</b> atual.</li> <li>• Qualquer <b>Options</b> selecionada, incluindo as opções Peak review display settings e a opção XIC Graph Title.</li> </ul>
Calibration Curve	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se o painel Calibration Curve estiver aberto.</li> <li>• As configurações <b>Show excluded standards, Show quality controls, Show legend, Use percent Y-axis e Log-log plot</b> no menu <b>Options</b>.</li> </ul>

**Tabela 6-3: Elementos de IU salvos com os layouts do espaço de trabalho (continuação)**

Painel	Elementos de IU salvos
Metric Plot	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se o painel Metric Plot estiver aberto.</li> <li>• Configurações do menu <b>Link</b>.</li> <li>• Configurações da caixa de diálogo Regression.</li> <li>• As configurações <b>Display "N/A" as 0.0, Show sample names, Show legend, Use percent Y-axis, Start Y-axis at 0</b> e <b>Connect with lines</b> no menu <b>Options</b>.</li> </ul>
Statistics Pane	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se o painel Statistics estiver aberto.</li> <li>• Ative as seleções de <b>Sample grouping</b>.</li> <li>• Ative as seleções de <b>Metric</b>.</li> </ul>

### Salvar o layout do espaço de trabalho atual

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Abra uma Results Table.
3. Personalize o layout do espaço de trabalho conforme necessário.
4. Clique em **Views > Save current layout**.  
A caixa de diálogo Save Workspace Layout As é aberta.
5. Digite um nome para o layout do espaço de trabalho e em seguida clique em **Save**.

### Aplicar outro layout do espaço de trabalho ao projeto atual

Aplicar diferentes layouts do espaço de trabalho ao arquivo Results permite que o usuário realize rapidamente tipos diferentes de análises de resultados nos mesmos dados.

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Abra um arquivo Results.
3. Clique em **Views > Apply different layout to current results**.  
A caixa de diálogo Apply a Workspace Layout é aberta.
4. Clique em **Browse**, selecione um layout e clique em **Open**.  
A caixa de diálogo Apply a Workspace Layout mostra uma visualização do layout do espaço de trabalho selecionado.
5. Clique em **OK**.

---

**Dica!** Aplique layouts do espaço de trabalho utilizado clicando em **Views > Recent layouts** e selecionando um layout.

---

### Definir o layout do espaço de trabalho como projeto padrão

Definir um layout de espaço de trabalho padrão para o projeto preserva um layout entre várias sessões ou usuários. Isso também faz com que novos arquivos Results criados dentro do projeto sejam abertos com o layout do espaço de trabalho padrão do projeto.

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Abra um um arquivo Results.
3. Personalize o layout do espaço de trabalho para se adequar ao projeto.
4. Clique em **Views > Set current layout as project default**.  
A caixa de diálogo Default Workspace Layout for the Project é aberta.
5. Digite um nome para o layout no campo **Default layout name** e em seguida clique em **OK**.
6. Clique em **Results > Save**.

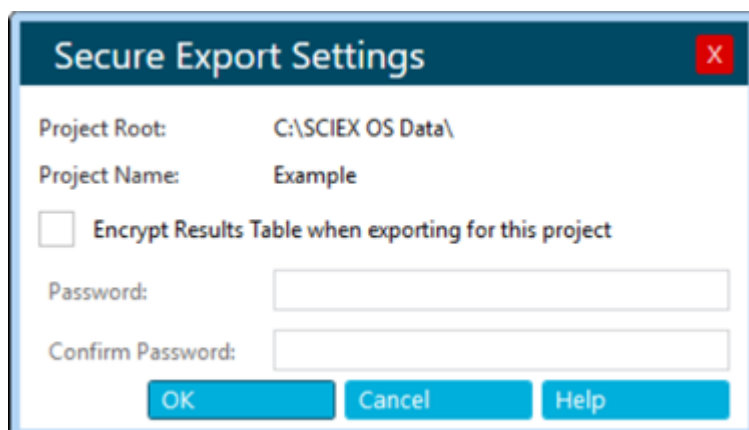
### Definir configurações de exportação segura do projeto

Somente um usuário com a função de Administrador pode realizar esta tarefa.

Se essa opção é selecionada, os dados no arquivo de texto são criptografados durante a exportação. Defina uma senha para habilitar a criptografia.

1. No espaço de trabalho Analytics, clique em **Projects > Project secure export settings**.

**Figura 6-22: Caixa de diálogo de configurações de exportação seguras**



2. Marque a caixa de seleção **Encrypt Results Table when exporting for this project**.
3. Digite uma senha no campo **Password**.
4. Digite a senha novamente no campo **Confirm Password**.
5. Clique em **OK**.

## Habilite a função Project Modified Peak Warning

Por padrão, essa opção não é selecionada. Quando selecionada, se um usuário alterar um cromatograma na Tabela de resultados e salvar as alterações, uma mensagem de alerta indicará que uma alteração foi feita. O usuário pode escolher entre continuar salvando ou retornar à Tabela de resultados.

No espaço de trabalho Analytics, clique em **Projects > Enable project modified peak warning**.

## Criar métodos de processamento

Métodos de processamento contêm configurações quantitativas e qualitativas para o processamento dos dados. A opção Non-targeted workflow é usada para componentes desconhecidos.

---

**Dica!** Para editar um método de processamento existente, clique em **Process Method > Open**.

---

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Clique em **Process Method > New**.

---

**Dica!** Para editar o método de processamento da Results Table atual, clique em **Process Method > Edit embedded method** e, em seguida, continue com a etapa 3.

---

3. Na página Workflow, selecione pelo menos um fluxo de trabalho e as amostras de referência. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

---

**Dica!** Para usar o fluxo de trabalho da reconstrução de massas, selecione apenas **Quantitation**.

---

4. Selecione a página Components e, em seguida, realize as seguintes etapas:
  - a. Se aplicável, selecione o fluxo de trabalho de reconstrução de massa clicando em **Options > Mass Reconstruction** e, em seguida, clicando em **Yes** na caixa de diálogo de confirmação.
  - b. Preencha a tabela de componentes. Para obter descrições dos campos nesta tabela, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

---

**Nota:** O fluxo de trabalho Mass Reconstruction está disponível somente quando o algoritmo de integração está definido como **MQ4** ou **Summation**.

---

**Dica!** Se um grupo estiver definido na tabela Components, o usuário poderá optar por somar os íons no grupo, mesmo que o íon precursor e o índice experimental sejam diferentes nas transações. Os íons somados não aparecem na tabela, mas aparecem na página Integration e na tabela de resultados como **group name > Sum**. Este recurso é útil para quantificar proteínas e peptídeos.

---

## Instruções de operação – Processamento

---

**Dica!** Se o tempo de retenção dos componentes não for conhecido, configure o **Retention Time Mode** para uma fórmula de massa ou química para **Find  $n$  peaks**, em que  $n$  é 1, 2, 5, 10 ou todos. O software identifica o número especificado de recursos com a maior área de pico, atribui o tempo de retenção apropriado e, em seguida, executa um fluxo de trabalho de processamento de pico direcionado. Quando o processamento está concluído, o método integrado para a Results Table pode ser salvo como um método direcionado

---

**Dica!** Para importar componentes ou componentes e parâmetros de integração de um arquivo de texto, use o comando adequado no menu **Import**. Se as informações do componente não contiverem unidades de concentração, o software usa as **Concentration units** definidas na caixa de diálogo Project Default Settings.

---

**Nota:** Os parâmetros de integração não podem ser importados dos métodos de processamento que usam o algoritmo de integração do AutoPeak.

---

**Nota:** Os parâmetros de integração podem ser importados dos métodos de quantificação do software Analyst. Os parâmetros do software Analyst são mapeados para os parâmetros correspondentes do SCIEX OS e as configurações padrão do projeto são usadas para qualquer parâmetro que não possa ser mapeado.

---

**Nota:** Os parâmetros de integração podem ser importados dos métodos de quantificação do software MultiQuant que não usam o algoritmo SignalFinder. Para os métodos MQ4, o **S/N Integration Threshold** é alterado de 0, o padrão no software MultiQuant, para o padrão do projeto. Os parâmetros para o software MultiQuant são mapeados para os parâmetros correspondentes para o SCIEX OS.

---

5. Selecione a página Components e, em seguida, realize as seguintes etapas:
  - a. Selecione os parâmetros de integração para cada componente. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

**Dica!** Para definir as regras de remoção automática de valores discrepantes, clique em **Options > Remove Outliers Automatically**. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

---

- b. (Opcional) Para visualizar a região de ruído, clique em **Options > Show Noise Regions**. Consulte a seção: [Trabalhe com regiões de ruído](#).

**Nota:** **Show Noise Regions** é exibido somente quando o algoritmo sinal para ruído é definido para **Standard Deviation** ou **Peak to Peak**.

---

6. (Se for aplicável) Selecione a página Library Search e, em seguida, defina os parâmetros de pesquisa da biblioteca. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o *Sistema de ajuda*.
7. Selecione a página Calculated Columns e, em seguida, defina todas as fórmulas personalizadas a serem usadas nas colunas calculadas personalizadas. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o *Sistema de ajuda*.



**Nota:** Para obter mais informações sobre as colunas calculadas, consulte a seção: [Colunas calculadas](#).

---

8. Selecione a página Flagging Rules e, em seguida, selecione as regras a serem usadas para destacar resultados na Results Table. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

Opcionalmente, crie regras de alerta personalizadas ou personalize os seguintes valores para as regras predefinidas:

- Critérios de aceitação para o seguinte:
    - Precisão de padrões e controles de qualidade.
    - Intervalo de concentração calculado para amostras desconhecidas.
    - Integração de pico
  - Configurações do sinalizador para precisão de massa, confiança do tempo de retenção, correspondência de isótopo, pontuação da biblioteca e pontuação do buscador de fórmulas
  - Configuração do sinalizador para aceitação da proporção de íons  
Proporção de íons é a proporção de resposta do pico, ou seja, a área ou altura do qualificador e quantificador.
- 

**Dica!** Para importar as regras de alerta de um arquivo de texto, clique em **Import**.

---

9. Selecione a página Formula Finder e em seguida selecione as configurações do localizador de fórmula. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
  10. (Se o fluxo de trabalho não direcionado estiver selecionado) Selecione a página Non-targeted Peaks e, em seguida, defina os parâmetros de pesquisa não direcionada. Para obter descrições dos campos nesta página, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
  11. Clique em **Save**.
- 

**Dica!** Se um método Não direcionado é criado, os parâmetros padrões do projeto atual são usados na integração do pico e salvos no arquivo do método de processamento. Se o método de processamento contiver os analitos conhecidos, os parâmetros de integração personalizados destes componentes não afetarão a integração do pico de componentes desconhecidos. Se o usuário alterar o parâmetro padrão posteriormente, o parâmetro alterado não afetará o método Non-targeted, que ainda conterá os parâmetros no momento em que o método foi criado. Somente o método Não direcionado recém-criado usa os parâmetros alterados.



---

## Processar dados

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Clique em **Results > New**.

## Instruções de operação – Processamento

---



3. Na caixa de diálogo Process New Results, use as setas (  e  ) para selecionar as amostras a serem processadas.
4. Selecione um método de processamento em um dos seguintes modos:
  - Clique em **Browse** e, em seguida, selecione um método de processamento e clique em **Open**.
  - Clique em **New** e, em seguida, crie o novo método de processamento. Consulte a seção: [Criar métodos de processamento](#).
5. (Opcional) Clique em **Edit** para editar o método de processamento. Consulte a seção: [Criar métodos de processamento](#).
6. Selecione uma amostra de comparação para fluxos de trabalho non-targeted.
7. Clique em **Process**.

---

**Nota:** Na análise não direcionada, o agrupamento automático por adutos é realizado. O algoritmo de agrupamento atribui modificadores de adutos para compostos com o mesmo tempo de retenção se a diferença de massas entre eles for associado a um aduto comum. Esse recurso ajuda a evitar a investigação de compostos duplicados com adutos de carga diferentes.

---

Se os dados contiverem colunas de lote personalizadas que possuem o mesmo nome como as colunas ou fórmulas existentes predefinidas da Tabela de resultados, uma mensagem de aviso será mostrada. Clique em **OK** para continuar. Um sublinhado (   ) é adicionado no início do nome dessas colunas.

8. Para mostrar ou ocultar os tipos de amostras, clique no ícone de filtro (  ) na coluna **Sample Type** e, em seguida, marque ou desmarque as caixas de seleção necessárias.
9. Para definir os filtros de aceitação, clique no ícone de filtro (  ) em qualquer uma das colunas de aceitação, selecione **Filter by Flag** e, em seguida, selecione **Pass** ou **Fail**.

---

**Nota:** As colunas Aceitação incluem **Accuracy**, **Accuracy Acceptance**, **Asymmetry Factor**, **Calculated Concentration**, **Concentration Acceptance**, **Integration Acceptance**, **Quality Retention Time Delta (min)**, **Retention Time Error (%)** e **Total Width**.


---

10. Para selecionar filtros de confiança qualitativos, clique no sinalizador **Confidence** e então selecione ou desmarque as caixas de seleção solicitadas.

---


**Nota:** Depois que a Tabela de resultados for gerada usando o algoritmo AutoPeak, se o usuário alterar a largura do XIC e o RT esperado, os dados serão reprocessados usando o modelo anterior de algoritmo, a menos que o usuário atualize o modelo conforme a nova largura do XIC e valores RT esperados.

---

11. Para filtrar com base em valores individuais para a coluna Tabela de resultados, clique no ícone de filtro (  ) no cabeçalho da coluna e, em seguida, marque as caixas de seleção para os valores a serem mostrados na Tabela de resultados.

**Dica!** Para aplicar filtros personalizados adicionais, selecione **Text Filters**.

---

**Dica!** Para aplicar novamente o filtro após uma alteração da Tabela de resultados, como uma alteração à contagem de área, clique em **Reapply Filter** ()

---

12. Salve o arquivo Resultados de uma das seguintes formas:




- Clique em **Results > Save**.
- Para impedir que alterações sejam feitas à Tabela de resultados, clique em **Results > Lock results file and save**.

### Adicionar amostras

Pré-requisitos
<ul style="list-style-type: none"><li>• No espaço de trabalho Analytics, uma Results Table é aberta.</li></ul>



Essa opção adiciona amostras a uma tabela de resultados atualmente ativa.

1. Clique em **More > Add samples**.
2. Na caixa de diálogo Select Samples, selecione as amostras solicitadas.
  - O painel Available exibe as subpastas, os arquivos wiff2 e as amostras disponíveis na pasta **Data** para o projeto atual.
  - Expanda cada pasta para ver todas as subpastas ou os arquivos wiff2. Se o arquivo wiff2 for expandido, ele será aberto para exibir as amostras disponíveis.
  - Utilize as setas para adicionar () ou remover () amostras.
  - Selecione amostras das seguintes maneiras:
    - Faça clique duplo em uma amostra individual.
    - Selecione uma amostra ou arquivo de dados e, em seguida, clique em .
    - Arraste uma amostra ou arquivo de dados do painel esquerdo para o painel direito.

Pressione **Shift** ou **Ctrl** para selecionar amostras ou arquivos múltiplos antes de movê-los.
3. Clique em **OK**.

Uma barra de progresso é exibida enquanto as novas amostras são integradas e adicionadas à tabela existente.

### Personalize a Results Table

<b>Pré-requisitos</b>
-----------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• No espaço de trabalho Analytics, uma Results Table é aberta.</li></ul> |
|--|

Selecione o formato numérico e as colunas a serem exibidas na tabela de resultados. As configurações da coluna podem ser aplicadas a todas as tabelas de resultados no projeto.

---

**Nota:** Algumas colunas críticas, como **Sample Name**, **Sample ID**, **Barcode** e assim por diante, não deverão ser ocultadas quando o usuário personalizar as configurações da coluna da tabela de resultados.

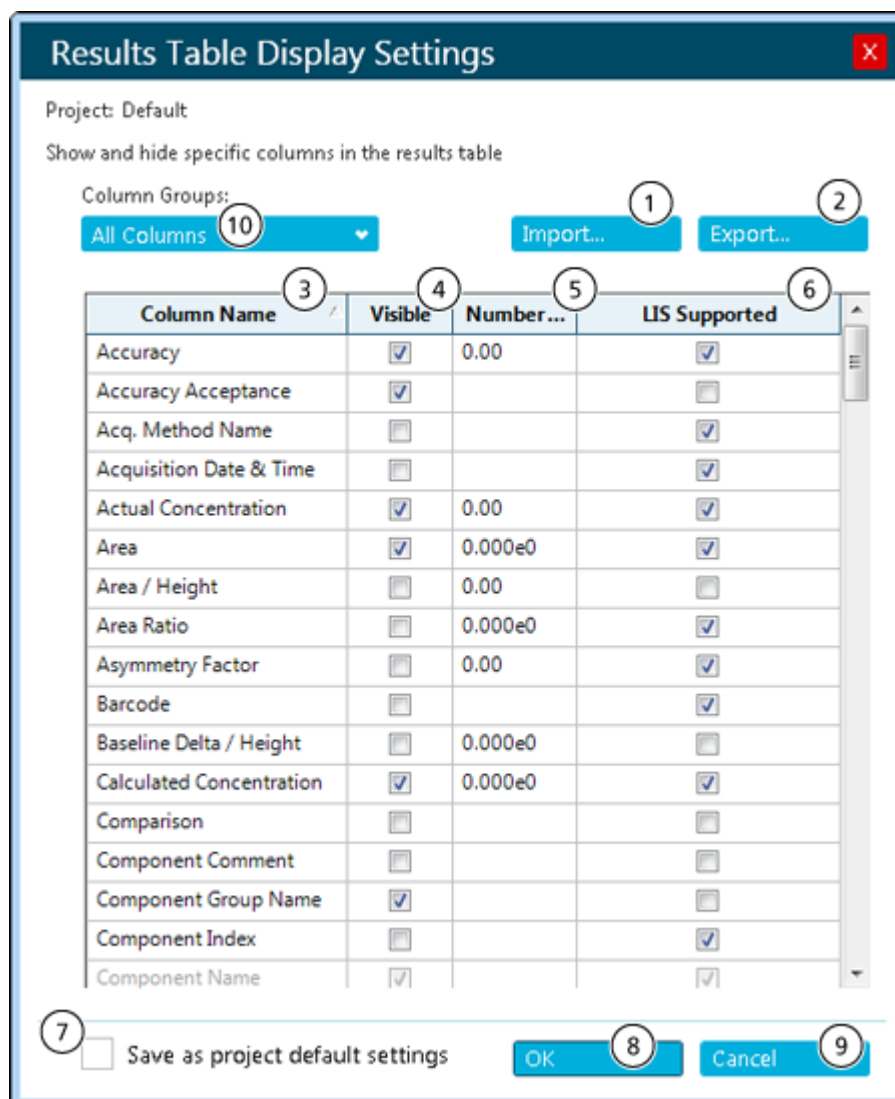
---

**Dica!** Se os nomes das colunas estiverem cortados, mova o cursor sobre o campo para exibir o nome da coluna em uma dica de ferramenta.

---

1. Clique em **More > Table display settings**.  
A caixa de diálogo Results Table Display Settings é aberta. Para obter uma descrição das colunas na Results Table, consulte a seção: [Colunas da Results Table](#).

Figura 6-23: Caixa de diálogo configurações de exibição da tabela de resultados



Item	Descrição
1	Clique para selecionar um arquivo de configurações da coluna salvo anteriormente usando o botão Export. Os campos da caixa de diálogo serão atualizados para utilizar as informações do arquivo selecionado.
2	Clique para salvar as configurações da caixa de diálogo atual em um arquivo. Utilize o botão Import para importar e usar essas configurações. Essa opção permite que o usuário alterne entre layouts de coluna diferentes.
3	O nome das colunas em ordem alfabética. <b>Nota:</b> Esta lista também inclui qualquer coluna calculada definida no método de processamento que foi usado para criar a Results Table.
4	Uma marca de verificação indica que a coluna está visível.

## Instruções de operação – Processamento

---

Item	Descrição
5	Para campos numéricos, utilize o formato 0.00 para observações não científicas e utilize o formato 0.00e0 para observações científicas. Altere os pontos decimais para indicar a precisão dos números que serão exibidos. Somente um ponto final "." pode ser usado como um separador decimal. <b>Nota:</b> O grupo de números não é compatível.
6	As linhas <b>LIS Supported</b> selecionadas são predefinidas pelo LIMS, e as seleções de coluna não podem ser alteradas.
7	Clique para utilizar as configurações de coluna em futuras tabelas de resultados.
8	Clique para aplicar as alterações e então feche a caixa de diálogo.
9	Clique para desconsiderar as alterações e então feche a caixa de diálogo.
10	Selecione uma categoria de coluna da tabela de resultados. Os usuários podem filtrar as colunas mostradas na tabela de resultados com base na seleção. Selecionar uma categoria ajuda o usuário a encontrar facilmente uma coluna na tabela de resultados.

2. Marque ou desmarque a caixa de seleção na coluna **Visible**, conforme necessário.

---

**Nota:** Além das colunas descritas na seção: [Colunas da Results Table](#), a Results Table pode conter colunas personalizadas calculadas e de texto. Colunas calculadas são identificadas com um asterisco.

---

3. (Opcional) Na coluna **Number Format**, altere o formato para inteiro ou notação científica.
4. (Opcional) Na coluna **Number Format**, altere o número dos pontos decimais para exibição.
5. Clique em **OK**.

As novas configurações serão aplicadas à tabela de resultados. As configurações também serão salvas e aplicadas quando uma nova tabela de resultados for criada ou uma tabela de resultados anteriormente salva for novamente aberta.

---

**Dica!** Use a linha do cabeçalho da Results Table para ajustar as larguras da coluna e a ordem da coluna. Arraste a borda do cabeçalho para alterar a largura. Arraste o cabeçalho da coluna para outro lugar na tabela de resultados para alterar a ordem da coluna. Clique no ícone de filtro (▼) no cabeçalho da coluna para aplicar um filtro na coluna. Quando o botão **Export** é usado para exportar uma Results Table, a largura da coluna, a ordem e as configurações do filtro são salvas no arquivo exportado.

---

## Criar um relatório

Pré-requisitos
<ul style="list-style-type: none"><li>No espaço de trabalho Analytics, uma Results Table é aberta.</li></ul>



---

**Dica!** Para selecionar os analitos a serem incluídos em um relatório, use a coluna **Reportable** na Results Table. Consulte a seção: [Colunas da Results Table](#).

---

1. Clique em **Reporting > Create Report and Save Results Table**.  
A caixa de diálogo Create Report é aberta.
2. Selecione um modelo na lista **Template name**.
3. Selecione um formato de relatório.
4. Para alterar o nome e o local de um arquivo, clique em **Browse**, navegue para um local diferente, digite um **File name** e, em seguida, clique em **Save**.

---

**Nota:** Por padrão, os relatórios são salvos em  
`ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter\Reports`.

---

5. Clique na caixa de seleção **Create an individual report for each sample**, se necessário.
6. (Opcional) Selecione um logo diferente para o relatório:
  - a. Clique em **Replace Logo**.
  - b. Utilize as opções da caixa de diálogos Replace Logo para modificar o logo, conforme solicitado.
  - c. Clique em **Save**.
  - d. Clique em **Cancel**.
7. Clique em **View Pages** para visualizar o relatório.
8. Clique em **Create**.

---

**Dica!** Para reportar os resultados selecionados usando um modelo como Per Sample Quant, Per Sample Qual, Per Sample Visible Rows Using Visible Analytes ou Positive Hits Qual, use filtros ou oculte as linhas não desejadas na Results Table.

---

**Dica!** Clique no exemplo no **Template View**, na caixa de diálogo Create Report para visualizar o layout do modelo de relatório. Para exibir um modelo específico, o usuário deve ter um arquivo jpg com o mesmo nome do modelo, além do sufixo [Snapshot\_X], em que X é o número do instantâneo na sequência. Não use espaços entre o nome do arquivo e o sufixo.

Por exemplo, o modelo All Peaks Qual.docx se chamaria: All Peaks Qual[Snapshot\_1].jpg All Peaks Qual[Snapshot\_2].JPG All Peaks Qual[Snapshot\_3].jpg

---

### Exportar e salvar uma Results Table

Pré-requisitos
----------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>No espaço de trabalho Analytics, uma Results Table é aberta.</li></ul> |
|--|

---

**Dica!** Para selecionar os analitos a serem exportados, use a coluna **Reportable** na Results Table. Consulte a seção: [Colunas da Results Table](#).

---

- Clique em **Reporting > Export results > Export and save Results Table**.  
A caixa de diálogo Export é aberta.
- Selecione as opções conforme necessário.  
Para obter descrições das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- Clique em **OK**.

### Exportar Tabela de resultados – Metric

Pré-requisitos
----------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>No espaço de trabalho Analytics, uma Tabela de resultados é aberta.</li></ul> |
|---|

---

**Nota:** O fabricante não assume responsabilidade ou responsabilidade contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, após os dados serem exportados do espaço de trabalho Analytics.

---

Exportar a Results Table é um dos métodos controlados de saída de dados no espaço de trabalho Analytics.

Esse recurso é usado para criar um texto delimitado por tabulações contendo informações da tabela de resultados. As informações são exportadas para todas as amostras e também para todos os componentes ou somente os componentes visíveis para aquele métrico ou campo selecionado.

- Clique em **Reporting > Export results > Results Table - Metric**.  
A caixa de diálogo Export Metric será aberta.
- Selecione a coluna a ser exportada no campo **Metric** e, em seguida, configure as opções. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.
- Clique em **OK**.



## Transferir resultados para um Watson LIMS

### Pré-requisitos

- Uma Results Table é aberta e bloqueada.
- O software Watson LIMS é aberto.

---

**Nota:** Um subconjunto das colunas na Results Table é transferido, incluindo algumas colunas ocultas, e algumas que não são designadas como **Reportable**.

---

1. Clique em **Reporting > Initiate Transfer to Watson LIMS**.  
A caixa de diálogo de transferência é aberta.
2. No software Watson LIMS, importe os dados.
3. Na caixa de diálogo de transferência no SCIEX OS, realize uma das seguintes ações:
  - Se a transferência tiver sido concluída com sucesso, clique em **Confirm**.
  - Se a transferência não tiver sido concluída com sucesso, clique em **Decline**.

## Transferir resultados para outro LIMS

### Procedimentos de pré-requisito

- Configure o LIMS no espaço de trabalho Configuration. Consulte a seção: [Selecionar Laboratory Information Management System \(LIMS\) Settings](#).
- Abra uma Tabela de resultados bloqueada.

---

**Dica!** Para selecionar os analitos a serem exportados, use a coluna **Reportable** na Tabela de resultados. Consulte a seção: [Colunas da Results Table](#).

---

1. Clique em **Reporting > Transfer Results to LIMS**.  
A caixa de diálogo LIMS Transfer é aberta.
2. Selecione um modelo na lista **Template**.
3. Clique em **Transfer**.

## Trabalhe com a Results Tables

As tabelas de resultados resumem a concentração calculada de um analito, bem como os resultados de análises quantitativas, como por exemplo ocorrências da biblioteca, resultados de localizador de fórmula, entre outros, em cada amostra desconhecida baseada na curva de calibração. As tabelas de resultados também incluem as curvas de calibração, bem como as estatísticas para os resultados. O usuário pode personalizar as tabelas de resultados e visualizá-la em layouts diferentes.

## Instruções de operação – Processamento

---

**Nota:** As colunas da Tabela de resultados com um asterisco (\*) são texto personalizado ou colunas calculadas.

---

Os dados de uma tabela de resultados podem ser exportados para um arquivo txt para uso em outros aplicativos, como o Microsoft Excel. O usuário pode exportar todos os dados da tabela de resultados ou somente os dados nas colunas visíveis.

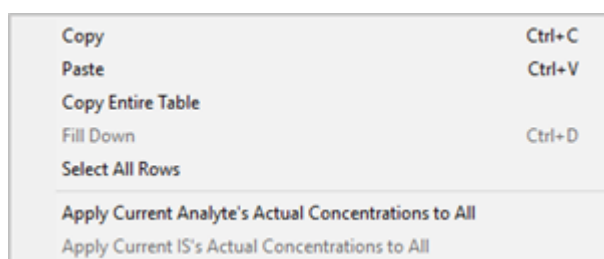
---

**Dica!** No caso de as tabelas de resultados terem sido organizadas vertical ou horizontalmente, clique em **Views > Reset layout** para retornar à tabela de resultados ao seu formato original.

---

Use o menu do clique com o botão direito do mouse para editar as linhas da Tabela de resultados. Para mostrar este menu, clique com o botão direito do mouse em qualquer ponto da Tabela de resultados.

**Figura 6-24: Menu ativo com o botão direito**



**Tabela 6-4: Comandos do menu do clique com o botão direito.**

Rótulo	Descrição
<b>Copy</b>	(Copiar) Utilize essa opção para copiar os dados atuais para a área de transferência.
<b>Paste</b>	(Colar) Utilize essa opção para colar dados da área de transferência na visualização atual.
<b>Copy Entire Table</b>	(Copiar tabela inteira) Utilize essa opção para copiar a tabela inteira para a área de transferência.
<b>Fill Down</b>	(Preencher) Utilize essa opção para replicar as informações na primeira linha selecionada para todas as linhas selecionadas subsequentes.
<b>Select All Rows</b>	(Selecionar todas as linhas) Use essa opção para selecionar todas as linhas na tabela de resultados atualmente ativa. Isso é útil quando o usuário quer aplicar um comando subsequente, como <b>Copy</b> , que operará nas linhas selecionadas.

Tabela 6-4: Comandos do menu do clique com o botão direito. (continuação)

Rótulo	Descrição
<b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b>	<p>(Aplicar concentrações reais do analito a todos) (Analitos) Se houver mais de um analito e se todos os analitos estiverem presentes nessas amostras na mesma concentração, utilize então essa opção para fornecer um atalho para ajustar o campo de concentração atual para todos os analitos das amostras padrão. Para utilizar esse recurso:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Utilize <b>Components and Groups List</b> para exibir apenas um analito específico na tabela. Consulte a seção: <a href="#">Componentes e lista de grupos</a>.</li> <li>2. (Opcional) Filtre a coluna <b>Sample Type</b> para visualizar somente as amostras padrão.</li> <li>3. Especifique a concentração real para cada analito, digitando nas células ou selecionando a coluna e colando o texto nela.</li> <li>4. Selecione <b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b>.</li> </ol> <p>Retorne para visualização de todos os componentes e tipos de amostras, conforme solicitado.</p>
<b>Apply Current IS's Actual Concentrations to All</b>	<p>(Aplicar concentrações reais do IS a todos) (Padrões internos) Se houver mais de um padrão interno e se todos os padrões internos estiverem presentes nessas amostras na mesma concentração, utilize então essa opção para fornecer um atalho para ajustar o campo de concentração atual para todos os padrões internos das amostras padrão. Para utilizar esse recurso:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Utilize <b>Components and Groups List</b> para exibir apenas um padrão interno específico na tabela. Consulte a seção: <a href="#">Componentes e lista de grupos</a>.</li> <li>2. (Opcional) Filtre a coluna <b>Sample Type</b> para visualizar somente as amostras padrão.</li> <li>3. Especifique a concentração real para cada padrão interno, digitando nas células ou selecionando a coluna e colando o texto nela.</li> <li>4. Selecione <b>Apply Current IS's Actual Concentrations to All</b>.</li> </ol> <p>Retorne para visualização de todos os componentes e tipos de amostras, conforme solicitado.</p>

## Filtros da Results Table

Use os campos na parte superior da Results Table para visualizar e filtrar o conteúdo.

Figura 6-25: Controles de filtragem



Tabela 6-5: Filtros da Results Table

Rótulo	Descrição
<b>x of y rows</b>	(x de y linhas) Mostra a quantidade de linhas visíveis (x) em relação ao total de linhas (y).
<b>Filters</b>	(Filtros) Mostra o número de colunas às quais os filtros são aplicados.
<b>Qualify for Rules Filters</b>	(Qualidade para filtros de regras) Alterna a visualização da Results Table entre as linhas que correspondem aos filtros dos critérios de aceitação ou filtros de tráfego de confiança e os que não correspondem. Critérios de aceitação e sinalizadores de confiança são aplicados no método de processamento.
<b>Reapply Filter</b>	(Reaplicar filtro) Reaplica novamente o filtro após uma alteração da Results Table, como uma alteração à contagem de área.  <b>Nota:</b> Todos os filtros são reaplicados automaticamente quando outro filtro é adicionado ou alterado.
<b>Clear</b>	(Apagar) Apaga todos os filtros.

## Colunas da Results Table

### Nota:

- Colunas com um (\*) são colunas de texto personalizado, colunas calculadas ou colunas criadas como resultado de uma regra de alerta combinada.
- Colunas com nomes que começam com um sublinhado ( \_ ) são colunas personalizadas do lote que possuem o mesmo nome como uma coluna ou fórmula predefinida da Results Table.
- A coluna **Format** indica como o campo é validado em fórmulas.
- Nas colunas que contêm números, os usuários podem alterar o formato do número e o número de dígitos significativos. Escolha entre **Decimal**, **Significant Digits** ou **Scientific Notation** na coluna **Number Format** e, em seguida, digite o número de dígitos relevantes na coluna **Number Format Precision**, na caixa de diálogo Results Table Display Settings.

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Accuracy</b>	(Precisão) Mostra a precisão das amostras de padrão e de controle de qualidade (QC). Para outros tipos de amostra, esse valor é exibido como <b>N/A</b> .  Para padrões de concentração conhecidos, a precisão das amostras de padrão e QC é definida como $100\% \times (\text{Calculated Concentration})/(\text{Actual Concentration})$ .	Número	S
<b>Accuracy Acceptance</b>	(Aceitação de precisão) Mostra o status de aceitação da recuperação.	Texto	N
<b>Acq. Method Name</b>	(Nome do método de aquisição) Mostra o nome do método de aquisição usado para adquirir a amostra.	Texto	S
<b>Acquisition Date &amp; Time</b>	(Data e hora da aquisição) Mostra a data e a hora em que a amostra foi adquirida.	Texto	S
<b>Actual Concentration</b>	(Concentração real) Para amostras de padrão e QC, mostra a concentração conhecida esperada.	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Adduct/ Charge</b>	(Aduto/Carga) Mostra o estado dos adutos ou da carga do composto. No fluxo de trabalho direcionado, este valor é definido pelo usuário. No fluxo de trabalho não direcionado, esse valor é configurado automaticamente pelo software se for habilitada a opção de agrupamento por adutos.	Texto	N
<b>Area</b>	(Área) Mostra a área do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, esse valor será definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	S
<b>Area / Height</b>	(Área/Altura) Mostra a área do pico detectada dividida pela altura. Se nenhum pico foi detectado, esse valor será definido como <b>N/A (N/A)</b> .	Número	N
<b>Area Ratio</b>	(Proporção da área) Para analitos que usam um padrão interno, mostra a proporção do analito <b>Area</b> para o <b>IS Area</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	S
<b>Area Ratio of comparison</b>	<p>(Proporção de comparação da área) Mostra a proporção da área da amostra/ amostra de controle.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Se não for descoberto nenhum pico no controle, o valor será <b>N/A (N/A)</b>.</li> <li>Se não for descoberto nenhum pico na amostra, o valor é 0.</li> <li>Se cada pico da amostra estiver abaixo do <b>Area Ratio Threshold</b>, o valor será <b>N/A (N/A)</b>.</li> <li>Se nenhuma amostra de comparação for usada, o valor é <b>No control sample</b> (Nenhuma amostra de controle).</li> <li>Para a amostra de controle, a relação da área para os picos descobertos é sempre 1.</li> </ul> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Número	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Asymmetry Factor</b>	(Fator de assimetria) Mostra a distância da linha de centro do pico até a inclinação reversa dividida pela distância da linha de centro do pico até a inclinação frontal, com todas as medições feitas até 10% da altura máxima do pico.	Número	S
<b>AutoPeak Asymmetry</b>	(Assimetria do AutoPeak) Mostra a relação entre a assimetria do pico integrado e a simetria esperada baseada no modelo. A relação igual a 1 indica um bom ajuste. Se o valor não for 1, a fonte de íons pode estar saturada ou a integração pode não estar correta.  Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.	Número	N
<b>AutoPeak Candidate Model Quality</b>	(Qualidade do modelo de candidato AutoPeak) Mostra a adequação do pico para uso na criação de um modelo de pico. Se o valor for significativamente maior que 1, a amostra usada para criar o método de quantificação é inadequada. Use um pico que apresente uma resposta maior ao criar o modelo e aplicar esse pico a todas as amostras.  Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.	Número	N
<b>AutoPeak Group Confidence</b>	(Confiança do grupo AutoPeak) Indica a probabilidade de que o grupo de picos reais esteja integrado e de que a integração não inclua um pico de ruído falso-positivo.  Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.	Número	N

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>AutoPeak Integration Quality</b>	<p>(Qualidade da integração AutoPeak)Mostra a qualidade dos dados. A qualidade é representada como um valor de 0 a 1. Se a qualidade for inferior a 0,6, investigue melhor a integração.</p> <p>Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.</p>	Número	N
<b>AutoPeak Model Source</b>	<p>(Fonte do modelo AutoPeak) Mostra os nomes das amostras e componentes que foram usados na modelagem dos picos. Se o componente usado na modelagem não for o mesmo componente integrado, avalie o modelo para determinar se ele é adequado.</p> <p>Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.</p>	Número	N
<b>AutoPeak Num Peaks</b>	<p>(Quantidade de picos do AutoPeak) Mostra o número dos picos adjacentes (convoluídos) detectados pelo algoritmo.</p> <p>Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.</p>	Número	N
<b>AutoPeak Peak Width Confidence</b>	<p>(Confiança de largura de pico do AutoPeak) Mostra o nível de confiança na largura do pico. O valor 1 indica que a largura de pico real e a largura de pico esperada são iguais. Um valor maior que 1 indica que a largura de pico real é maior que a largura de pico esperada. Um valor menor que 1 indica que a largura de pico real é menor que a largura de pico esperada ou que o pico é mais amplo devido a uma alteração nas condições cromatográficas.</p> <p>Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.</p>	Número	N



Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>AutoPeak Saturated acc</b>	<p>(AutoPeak saturado) Se a opção <b>Saturation correction</b> tiver sido usada e o pico correspondente tiver sido saturado, de modo que o modelo ajustado seja ampliado acima do pico, este campo mostrará <b>Yes</b> (Sim). Caso contrário, a coluna ficará em branco. Se a precisão e %CVs das amostras a concentrações mais altas não estiverem dentro do intervalo aceitável, ajuste a <b>Saturation correction</b>.</p> <p>Aplicável somente para métodos de processamento que usam o algoritmo de integração AutoPeak.</p>	Texto	N
<b>Barcode</b>	<p>(Código de barras) Mostra o ID exclusivo de uma amostra. O ID exclusivo é inicializado desde o valor originalmente especificado no lote usado para adquirir os dados.</p> <p>O <b>Barcode</b> pode conter até 20 caracteres. O <b>Barcode</b> não pode conter nenhum desses caracteres inválidos: \ / : ; * ? "&lt; &gt; = ou caracteres de 0 a 31 da tabela ASCII.</p>	Texto	S
<b>Baseline Delta/ Height</b>	<p>(Delta/Altura da referência) Mostra o valor absoluto da diferença entre a altura da referência, no início do pico e no final do pico, e a altura real do pico. Valores superiores a 0,1 indicam que a referência pode não ter sido integrada corretamente e que o pico deve ser revisado.</p>	Número	N
<b>Calculated Concentration</b>	<p>(Concentração calculada) Para padrões de concentração conhecidos, mostra o valor da concentração calculado de retorno a partir da curva de calibração. Equações de regressão descrevem como uma regressão é realizada pelos vários tipos e ponderação de regressão.</p>	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Combined Score</b>	(Pontuação combinada) (Opcional) Mostra uma pontuação de número único que pode ser usada para fins de comparação relativa.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	N
<b>Comparison</b>	(Comparação) Exibe os componentes na amostra de comparação.	Número	N
<b>Component Comment</b>	(Comentário do componente) Mostra um comentário arbitrário sobre o analito ou padrão interno que se aplica a todas as amostras.	Texto	N
<b>Component Group Name</b>	(Nome do grupo do componente) Mostra qualquer nome de grupo associado com o analito ou padrão interno.	Texto	N
<b>Component Index</b>	(Índice do componente) Mostra o índice do analito ou padrão interno no método de processamento original.	Número	S
<b>Component Name</b>	(Nome do componente) Mostra o nome do analito ou padrão interno.  Esta coluna está sempre visível na tabela de resultados. Na caixa de diálogo Column Settings, a caixa de seleção não fica disponível.  O <b>Component Name</b> pode conter até 50 caracteres.  <b>Nota:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• O <b>Component Name</b> pode ser alterado somente no método de processamento e não na Results Table.</li><li>• Esta coluna é obrigatória para a transferência do Sistema de gerenciamento de informações laboratoriais (LIMS).</li></ul>	Texto	S

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Component Type</b>	(Tipo de componente) Mostra o tipo de analito: <b>Quantifier</b> , <b>Qualifier</b> ou <b>Internal Standard</b> .	Texto	N
<b>Conc. Units</b>	(Unidades de concentração) Mostra as unidades de concentração.	Texto	S
<b>Concentration Acceptance</b>	(Aceitação da concentração) Mostra o status de aceitação da concentração calculada.	Número	N
<b>Concentration Ratio</b>	(Proporção da concentração) Para analitos que usam um padrão interno, mostra a proporção do <b>Actual Concentration</b> para o <b>IS Actual Concentration</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>Difference from Average Sample Time</b>	(Diferença do tempo médio da amostra) Mostra a diferença entre o tempo da análise para essa amostra e o tempo de análise médio para todas as amostras.	Número	N
<b>Dilution Factor</b>	(Fator de diluição) Mostra o fator pelo qual a amostra foi diluída. Esse fator é usado no cálculo da curva de calibração.	Número	S
<b>End Time</b>	(Tempo final) Mostra o tempo de retenção final do pico detectado, em minutos.	Número	S
<b>End Time at 10%</b>	(Tempo final a 10%) Mostra o tempo, em minutos, ao longo da parte traseira do pico quando a intensidade do pico está em 10% da altura do pico.	Número	N
<b>End Time at 5%</b>	(Tempo final a 5%) Mostra o tempo em minutos do final de eluição do analito, quando a intensidade do pico está em 5% da altura do pico.	Número	N

## Instruções de operação – Processamento

---

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Expected Ion Ratio</b>	<p>(Proporção de íons esperada) Mostra a proporção de íons esperada para amostras desconhecidas, QC e padrão.</p> <p>Para cada componente em um grupo, a <b>Expected Ion Ratio</b> é a média das proporções de íons dos padrões. Um padrão não está incluído no cálculo da <b>Expected Ion Ratio</b> do componente se as seguintes condições se aplicarem:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. A área do pico é N/A.</li><li>2. A coluna Use não está selecionada.</li></ol>	Número	S
<b>Expected RT</b>	(RT esperado) Mostra o tempo de retenção esperado original do método de processamento, em minutos.	Número	S
<b>Expected MW</b>	<p>(Peso molecular esperado) Mostra o peso molecular original esperado, a partir do método de processamento, em Da.</p> <p>Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.</p>	Número	S
<b>Formula</b>	(Fórmula) (Opcional) Mostra uma fórmula química válida. Se a fórmula química for inválida, ela não será mostrada pelo software. Se a fórmula química for válida, as colunas <b>Mass (Da)</b> e <b>Isotope</b> serão preenchidas automaticamente.	Texto	S

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Formula Confidence</b>	<p>(Confiança da fórmula) Mostra o nível de confiança do <b>Formula Finder Score</b> como porcentagem. É calculada com base em:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Como o espectro de MS atual se encaixa no espectro teórico para o composto, com base na massa.</li> <li>• Como o espectro MS/MS adquirido se encaixa no espectro MS/MS encontrado no banco de dados do software LibraryView.</li> </ul> <p>A pontuação do espectro MS possui duas vezes o peso da pontuação do espectro MS/MS.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Texto	N
<b>Formula Finder</b>	<p>(Buscador de fórmulas) Mostra a pontuação de número único que pode ser usada para fins de comparação relativa. O valor pode ser atualizado ao usar dados da tabela de resultados do Formula Finder na revisão do pico.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Número	N
<b>Formula Finder Results</b>	<p>(Resultados do buscador de fórmulas) (Opcional) Mostra a melhor correspondência dos resultados do buscador de fórmulas.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Texto	N
<b>Formula Finder Score</b>	<p>(Pontuação do buscador de fórmulas) (Opcional) Mostra uma pontuação de número único que pode ser usada para fins de comparação relativa.</p>	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Found at Fragment</b>	(Encontrados em fragmento) (Opcional) Mostra o melhor Fragment Mass (Da) solicitado no qual foram encontrados espectros correspondentes.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	S
<b>Found at Mass</b>	(Encontrados em massa) (Opcional) Mostra o melhor Extraction Mass (Da) solicitado no qual foram encontrados espectros correspondentes.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	S
<b>Fragment Mass</b>	(Massa do fragmento) (Opcional) Mostra o Mass Fragment, conforme especificado no método. O precursor do fragmento é extraído do MS/MS na coluna <b>Extraction Mass (Da)</b> . Quando fornecido, este valor deve ser numérico.	Número	S
<b>Fragment Mass Error (ppm)</b>	(Erro de massa do fragmento (ppm)) (Opcional) Mostra a diferença entre o Found at Fragment e o Fragment Mass, em ppm.	Número	S
<b>Fragment Mass Error (mDa)</b>	(Erro de massa do fragmento (mDa)) (Opcional) Mostra a diferença entre o Found at Fragment e o Fragment Mass, em mDa.	Número	S
<b>Fragment Mass Error Confidence</b>	(Confiança do erro de massa do fragmento) (Opcional) Mostra o nível de confiança no erro de massa do fragmento.	Texto	S
<b>Height</b>	(Altura) Mostra a altura do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, esse valor será definido como <b>N/A</b> (N/A).	Número	S
<b>Height Ratio</b>	(Proporção da altura) Para analitos que usam um padrão interno, mostra a proporção do <b>Height</b> para o <b>IS Height</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A</b> (N/A).	Número	S

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Index</b>	(Índice) Mostra o índice da linha no original, de forma não ordenada. Se uma tabela for ordenada baseada em outra coluna, então ela pode retornar à forma original ao ser ordenada nessa coluna.	Número	N
<b>Injection Volume</b>	(Volume da injeção) Mostra o volume da amostra definido no método e injetada pelo gerador de amostras automático.	Número	S
<b>Integration Acceptance</b>	(Aceitação da integração) Mostra o quanto a integração do pico atende aos critérios de aceitação. É calculada com base nesses fatores, conforme configurado nas regras de alerta: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Qualidade da integração</li> <li>• Fator de assimetria</li> <li>• Largura total do pico, em minutos</li> <li>• Erro do tempo de retenção, medido como porcentagem ou em minutos</li> </ul>	Número	N
<b>Integration Type</b>	(Tipo de integração) Mostra o tipo de integração. <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Baseline:</b> um pico autônomo que foi integrado normalmente.</li> <li>• <b>Valley:</b> indica que houve dois picos adjacentes e que o sinal não retornou para o valor da referência entre eles.</li> <li>• <b>N/A (N/A):</b> indica que nenhum pico foi detectado.</li> <li>• <b>Manual:</b> indica que o pico foi manualmente integrado.</li> </ul>	Texto	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Ion Ratio</b>	<p>(Proporção de íons)Mostra a proporção de íons. Proporções de íons são determinadas quando pelo menos duas transições MRM de um único analito foram coletadas para um grupo.</p> <p>Todos os analitos em um grupo constituem um subgrupo de Analitos. Todos os padrões internos em um grupo constituem um subgrupo de IS. O primeiro componente num subgrupo é usado como íons do quantificador. O restante dos componentes do subgrupo é usado como íons do qualificador.</p> <p><i>Proporção de íons = (Área do pico ou altura do qualificador) / (Área do pico ou altura do quantificador)</i></p> <p>A proporção de íons pode ser calculada para a área do pico ou altura do pico. Se o método de processamento usar a área para a regressão do primeiro componentes, ou seja, o componente para o qual o índice do componente for 1, na Results Table, a área do pico será usada para calcular a proporção de íons para toda a Results Table. Se a altura é usada para a regressão do primeiro componente, então a altura do pico é usada para cálculo.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Se um componente não for membro de um grupo, o valor de <b>Ion Ratio</b> será definido como <b>N/A(N/A)</b>.</li> <li>• Se o pico não for encontrado, o valor de <b>Ion Ratio</b> será definido como <b>N/A(N/A)</b>.</li> <li>• Se a proporção de íons for aplicada a todos os componentes nos subgrupos do analito e IS, o qualificador será o quantificador.</li> <li>• Se a integração alterar para ambos os picos do quantificador e</li> </ul>	Número	S



Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
	<p>qualificador, a razão entre os íons será recalculada.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> O usuário pode definir regras de alerta para a proporção de íons no método de processamento.</p>		
<b>Ion Ratio Acceptance</b>	(Aceitação da proporção de íons) Mostra o status de aceitação da proporção de íons.	Número	N
<b>Ion Ratio Confidence</b>	<p>(Confiança da proporção de íons) Mostra o nível de confiança na proporção de íons.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Texto	N
<b>IS</b>	<p>(Padrão interno) Mostra se a linha é um padrão interno. Uma caixa de seleção marcada indica que o componente para a linha é um padrão interno, não um analito.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> A caixa de seleção <b>IS</b> é selecionada automaticamente para nomes de amostras que contêm .heavy ou -cis porque essas amostras são definidas como padrões internos em fluxos de trabalho de proteômica. Para outros fluxos de trabalho, não são padrões internos, então a caixa de seleção <b>IS</b> deve ficar desmarcada.</p>	Número	N
<b>IS Actual Concentration</b>	(Concentração real do IS) Mostra a concentração real para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Area</b>	(Área do IS) Mostra a área para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>IS Area / Height</b>	(Área/Altura do IS) Mostra a proporção do <b>IS Area</b> para o <b>IS Height</b> para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Baseline Delta / Height</b>	(Delta/Altura da referência do IS) Mostra o valor absoluto da diferença de altura entre a referência, no início do pico e no final do pico, e a altura real do pico para o padrão interno. Valores superiores a 0,1 indicam que a referência pode não ter sido integrada corretamente e que o pico deve ser revisado.	Número	N
<b>IS Comment</b>	(Comentário do IS) Mostra um comentário arbitrário para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Texto	N
<b>IS End Time</b>	(Tempo final do IS) Mostra a hora em que termina a aquisição para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Expected MW</b>	(Peso molecular IS esperado) Mostra o peso molecular esperado para o padrão interno associado com o analito atual, em Da. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .  Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.	Número	S
<b>IS Expected RT</b>	(Tempo de retenção esperado do IS) Mostra o tempo de retenção esperado para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>IS Height</b>	(Altura do IS) Mostra a altura para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Integration Type</b>	(Tipo de integração do IS) Mostra o tipo de integração para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Texto	N
<b>IS Mass Info</b>	(Informações da massa do IS) Mostra as informações sobre massa para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Texto	N
<b>IS MW</b>	(Peso molecular IS) Mostra o peso molecular encontrado para o padrão interno associado com o analito atual, em Da. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .  Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.	Número	N
<b>IS MW Delta (Da)</b>	(IS MW Delta (Da)) Mostra a diferença entre o peso molecular esperado e encontrado para o padrão interno, em Da.  Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.	Número	S
<b>IS MW Delta (ppm)</b>	(IS MW Delta (ppm)) Mostra a diferença entre o peso molecular esperado e encontrado para o padrão interno, em ppm.  Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>IS Name</b>	(Nome do IS) Mostra o nome do padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Texto	N
<b>IS Peak Comment</b>	(Comentário do pico do IS) Mostra um comentário do pico para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Texto	N
<b>IS Quality</b>	(Qualidade do IS) Mostra a qualidade do padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Region Height</b>	(Altura da região do IS) Mostra a altura para a região do padrão interno. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Retention Time</b>	(Tempo de retenção do IS) Mostra o tempo de retenção para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Signal / Noise</b>	(Sinal/Ruído do IS) Mostra a relação sinal-ruído para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Start Time</b>	(Tempo de início do IS) Mostra o tempo de início para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>IS Total Width</b>	(Largura total do IS) Mostra a largura total para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>IS Width at 50%</b>	(Largura do IS a 50%) Mostra a largura em 50% para o padrão interno associado ao analito atual. Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	N
<b>Isotope Confidence</b>	(Confiança do isótopo) Mostra o nível de confiança da razão isotópica.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Texto	N
<b>Isotope Ratio Difference</b>	(Proporção do isótopo) Identifica a diferença entre o padrão isotópico teórico (com base na fórmula) e o padrão isotópico dos espectros adquiridos.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	N
<b>LC Method</b>	(Método de LC) Mostra o nome do método de LC usado para adquirir os dados.	Texto	N
<b>Library Confidence</b>	(Confiança da biblioteca) Mostra o nível de confiança na <b>Library Hit</b> com base no <b>Library Score</b> do resultado.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Texto	N

## Instruções de operação – Processamento

---

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Library Hit</b>	<p>(Resultado da biblioteca) Mostra o nome do composto da melhor correspondência com a biblioteca, ou seja, o composto com a maior pontuação de pureza e a fórmula correspondente à fórmula solicitada.</p> <p>O valor pode ser atualizado ao usar dados da grade Peak Review Library Search Results na revisão do pico. Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Texto	N
<b>Library Score</b>	<p>(Fonte da biblioteca) Mostra até que ponto a correspondência da biblioteca combina com a massa encontrada.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Número	N
<b>Mass Error (ppm)</b>	<p>(Erro de massa (ppm)) Mostra a diferença entre a massa encontrada e a massa extraída, expressa em partes por milhão.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Número	N
<b>Mass Error (mDa)</b>	<p>(Erro de massa (mDa)) Mostra a diferença entre a massa encontrada e a massa extraída, expressa em miliDaltons.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Número	N
<b>Mass Error Confidence</b>	<p>(Confiança do erro de massa) Mostra o nível de confiança no erro de massa.</p> <p>Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.</p>	Texto	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Mass Info</b>	<p>(Informações de massa) Mostra informações sobre a massa associadas ao componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Para experimentos MRM, é Q1/Q3 e para experimentos de perfil ou análise completa, é Start - Stop.</li> <li>• Para os experimentos UV, ADC ou DAD, são as informações de comprimento da onda (DAD) ou do canal (UV/ADC).</li> </ul> <p>Se a massa do fragmento existir, ela será usada para extração XIC.</p> <p>Se não houver massa de um fragmento, a massa precursora deverá ser usada para extração XIC.</p>	Texto	S
<b>Modified</b>	<p>(Modificado) Mostra se os parâmetros de descoberta de pico foram modificados. Uma caixa de seleção marcada indica que os parâmetros de descoberta de pico no método de processamento foram modificados usando o painel Peak Review.</p>	Número	S
<b>MS Method</b>	<p>(Método de MS) Mostra o nome do método de MS usado para adquirir os dados.</p>	Texto	N
<b>MW</b>	<p>(MW) Mostra o peso molecular encontrado do analito, a partir do gráfico reconstruído, em Da.</p> <p>Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.</p>	Número	S
<b>MW Delta (Da)</b>	<p>(MW Delta (Da)) Mostra a diferença entre o peso molecular esperado e encontrado, em Da.</p> <p>Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.</p>	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

---

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>MW Delta (ppm)</b>	(MW Delta (ppm)) Mostra a diferença entre o peso molecular esperado e encontrado, em ppm.  Aplicável somente aos fluxos de trabalho da reconstrução de massa.	Número	S
<b>Non-Targeted Peak</b>	(Pico não direcionado) Indica se o pico foi encontrado pelo Enhanced Peak Finder.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	N
<b>Operator Name</b>	(Nome do operador) Mostra o nome do operador do instrumento que adquiriu a amostra.	Texto	S
<b>Original Filename</b>	(Nome do arquivo original) Mostra o nome do arquivo.	Texto	S



Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Outlier Reasons</b>	<p>(Razões do valor discrepante) Quando uma remoção automática de valores discrepantes foi habilitada no método de quantificação, mostra que critério foi encontrado fora dos limites pré-determinados para o componente.</p> <p>A coluna <b>Outlier Reasons</b> é vinculada às regras para remoção automática de valores discrepantes no método de quantificação. É uma coluna predefinida na tabela de resultados.</p> <p>O motivo pelo qual o anexo é sinalizado:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Accuracy</li> <li>• Concentration</li> <li>• Proporção de íons</li> </ul> <p>Se há um pico para um dos quantificadores ou qualificadores, então a proporção de íons será sinalizada pelos dois componentes. Se nenhum desses componentes tiver picos, a proporção de íons não será sinalizada para nenhum dos componentes.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Não é possível calcular a proporção de íons prevista</li> <li>• Uma regra de sinalização personalizada criada pelo usuário falhou</li> </ul>	Texto	N
<b>Peak Comment</b>	(Comentário do pico) Mostra um comentário arbitrário para a linha.	Texto	N
<b>Plate Number</b>	(Número da placa) Mostra o número de placa do gerador de amostras automático usado para adquirir dados, conforme indicado no Editor de lote.	Texto	S
<b>Points Across Baseline</b>	(Pontos ao longo da referência) Mostra o número de análises ao longo do pico.	Número	N

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Points Across Half Height</b>	(Pontos ao longo de metade da altura) Mostra o número de varreduras em um pico com aproximadamente 50% da altura.	Número	N
<b>Polarity</b>	(Polaridade) Mostra a polaridade do experimento usado para adquirir a amostra.	Texto	N
<b>Precursor Mass</b>	(Massa do precursor) Mostra os parâmetros de entrada do processamento obtidos do método de processamento.  Esta coluna está sempre visível na tabela de resultados. Na caixa de diálogo Column Settings, a caixa de seleção não fica disponível.	Número	N
<b>Proc. Method Name</b>	(Nome do método de processamento) Mostra o nome do método de processamento que criou a Results Table.	Texto	S
<b>Quality</b>	(Qualidade) Mostra a qualidade do pico integrado. A área do pico integrado e a área de uma janela RT maior são comparadas. Um valor de 0 indica que o pico está mal integrado ou que não há pico. Um valor de 1,0 indica um pico bem integrado que não precisa ser analisado.	Número	N
<b>Rack Number</b>	(Número do rack) Mostra o número da bandeja do gerador de amostras automático usado para adquirir dados, conforme indicado no editor de lote.	Texto	S
<b>Region Height</b>	(Altura da região) Mostra a altura de pico do pico mais alto na proximidade do pico detectado. Isso é útil em conjunto com o campo <b>Quality</b> . Picos com uma baixa qualidade que também têm uma <b>Region Height</b> razoável devem ser revisados. Se o <b>Region Height</b> for pequeno, não haverá um pico significativo.	Número	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Relative RT</b>	(RT relativo) Para analitos que estão usando um padrão interno, mostra a proporção do <b>Retention Time</b> para o <b>IS Retention Time</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é definido como <b>N/A(N/A)</b> .	Número	S
<b>Reportable</b>	(Reportável) Mostra se o resultado está incluído em relatórios, exportações e transferências de LIMS.	Número	S
<b>Retention Time</b>	(Tempo de retenção) Mostra o tempo de retenção real do pico detectado, em minutos.	Número	S
<b>Retention Time Delta (min)</b>	(Delta do tempo de retenção) Mostra a diferença entre o tempo de retenção definido para a massa e o tempo de retenção real.	Número	N
<b>Retention Time Error (%)</b>	(Erro do tempo de retenção (%)) Mostra o erro percentual encontrado entre "Found at RT" e "Expected RT".  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Número	N
<b>RT Confidence</b>	(Confiança do RT) Mostra a confiança no tempo de retenção.  Aplicável somente a fluxos de trabalho qualitativos.	Texto	N
<b>Sample Comment</b>	(Comentário da amostra) Mostra um comentário especificado pelo usuário para a amostra.	Texto	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Sample ID</b>	<p>(ID da amostra) Mostra um identificador especificado pelo usuário para a amostra. O <b>Sample ID</b> (Nome da amostra) é especificado no Batch Editor (Editor do lote ) antes da submissão da amostra para aquisição.</p> <p>Se o fluxo de trabalho de adição padrão for ativado no método de processamento, o <b>Sample ID</b> será usado como um identificador de grupo para cada grupo de adição padrão. O SCIEX OS vincula cada amostra com uma concentração de analitos desconhecida a amostras às quais foram adicionadas concentrações conhecidas e variadas do mesmo analito.</p> <p>O <b>Sample ID</b> pode conter até 252 caracteres. O <b>Sample ID</b> não pode conter nenhum desses caracteres inválidos: \ / : ; * ? "&lt; &gt; = ou caracteres de 0 a 31 da tabela ASCII.</p>	Texto	S
<b>Sample Index</b>	<p>(Índice da amostra) Mostra o índice da amostra atual.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Esta coluna é bloqueada e sempre exibida à esquerda da Results Table.</p> <hr/>	Número	S

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Sample Name</b>	<p>(Nome da amostra) Mostra um nome especificado pelo usuário para a amostra. O <b>Sample Name</b> (Nome da amostra) é especificado no Batch Editor (Editor do lote ) antes da submissão da amostra para aquisição.</p> <p>O <b>Sample Name</b> deve conter entre 1 e 252 caracteres. O <b>Sample Name</b> não pode conter nenhum desses caracteres inválidos: \ / : ; * ? "&lt; &gt; = ou caracteres de 0 a 31 da tabela ASCII.</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Esta coluna é bloqueada e sempre exibida à esquerda da Results Table.</p>	Texto	S
<b>Sample Type</b>	(Tipo de amostra) Mostra o tipo de amostra.	Texto	S
<b>Scanned Barcode</b>	(Código de barras analisado) Mostra o código de barras digitalizado antes da injeção.	Texto	S
<b>Signal / Noise</b>	<p>(Sinal/Ruído) Mostra uma estimativa da relação entre a altura do pico para o pico detectado e o ruído apresentado no cromatograma.</p> <p>Para o algoritmo de integração AutoPeak , , o ruído é estimado usando o ruído relativo calculado e a linha base na posição próxima ao pico. O algoritmo MQ4 usa uma abordagem similar, exceto que a linha base é estimada usando o cromatograma inteiro.</p>	Número	S
<b>Slope of Baseline</b>	<p>(Inclinação da referência) Mostra a inclinação do pico integrado a partir da referência:</p> $\frac{((\text{Intensidade no fim do pico}) - (\text{intensidade no início do pico}))}{\text{largura do pico}}$	Número	N
<b>Start Time</b>	(Tempo inicial) Mostra o tempo inicial real do pico detectado, em minutos.	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Start Time at 10%</b>	(Tempo inicial a 10%) Mostra o tempo, em minutos, ao longo da parte dianteira do pico, quando a intensidade do pico está em 10% da altura do pico.	Número	N
<b>Start Time at 5%</b>	(Tempo inicial a 5%) Mostra o tempo, em minutos, ao longo da parte dianteira do pico, quando a intensidade do pico está em 5% da altura do pico.	Número	N
<b>Std Addition Accuracy</b>	(Precisão de adição de padrões) Mostra a precisão das amostras de concentrações conhecidas que são quantificadas pela adição de padrões de concentração variada. Quando o fluxo de trabalho com adição padrão está ativado no método de processamento, o <b>Sample Type</b> de todas as amostras é definido automaticamente como <b>Standard</b> . Se <b>Sample Type</b> for alterado para outro tipo, ou se o fluxo de trabalho da adição padrão não for habilitado, esse valor será definido para <b>N/A</b> (N/A). Para amostras de concentração conhecidas, como uma amostra do controle de qualidade em um lote, o <b>Std Addition Accuracy</b> será definido como:  $100\% \times (\text{concentração calculada da adição padrão}) / (\text{concentração real da adição padrão})$ .	Número	N
<b>Std Addition Actual Concentration</b>	(Concentração real da adição padrão) Mostra a concentração conhecida esperada especificada pelo usuário para amostras que são quantificadas por adição padrão. Por exemplo, uma amostra de controle de qualidade em um lote. Se <b>Sample Type</b> não for <b>Standard</b> , este valor será definido como <b>N/A</b> (N/A).	Número	N

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Std Addition Calculated Concentration</b>	<p>(Concentração calculada da adição padrão) Mostra o valor da concentração inversamente calculada ao extrapolar a curva de adição padrão para a interseção de x por meio de regressão linear e sem aplicar ponderação. No caso de amostras quantificadas por adição padrão, <b>Std Addition Calculated Concentration</b> é definida como:</p> <p>Intercept/Slope</p> <p>Se o <b>Sample Type</b> não for <b>Standard</b>, se o fluxo de trabalho com adição padrão não estiver ativado no método de processamento ou se nenhum pico for encontrado nas amostras não enriquecida de um grupo com adição padrão, este valor será definido como <b>N/A(N/A)</b>.</p>	Número	N
<b>Tailing Factor</b>	<p>(Fator caudal) Mostra a distância da inclinação frontal do pico até a inclinação traseira, dividida por duas vezes a distância da linha de centro do pico da inclinação frontal. Todas as medições são feitas a 5% da altura máxima do pico.</p>	Número	N
<b>Time Since First Sample (min)</b>	<p>(Tempo desde a primeira amostra (minutos)) Mostra a quantidade de tempo, em minutos, desde que a aquisição da primeira amostra foi iniciada.</p>	Número	N
<b>Time Since Last Sample (sec)</b>	<p>(Tempo desde a última amostra (segundos)) Mostra a quantidade de tempo, em segundos, desde que a aquisição da última amostra foi iniciada.</p>	Número	N
<b>Total Width</b>	<p>(Largura total) Mostra a largura do pico cromatográfico, em minutos, na linha base.</p>	Número	S

## Instruções de operação – Processamento

Rótulo	Descrição	Formatar	Compatível com LIS
<b>Used</b>	(Usado) Mostra se o resultado será usado. <ul style="list-style-type: none"><li>• Para todas as amostras, uma caixa de seleção marcada indica que o resultado será usado no cálculo dos valores de referência e execução das regras de sinalização.</li><li>• No caso de amostras padrão, uma caixa de seleção marcada indica que o resultado na construção dos cálculos da curva de calibração, regressão e estatísticas.</li><li>• Para amostras de QC, uma caixa de seleção marcada indica que o resultado é usado para o cálculo estatístico de controle de qualidade.</li><li>• Para outros tipos de amostras, uma caixa de seleção marcada indica que o resultado é usado nos cálculos.</li></ul>	Número	S
<b>Vial Number</b>	(Número do frasco) Mostra o número do frasco no gerador de amostras automático usado para adquirir dados, conforme originalmente especificado no lote.	Texto	S
<b>Width at 10%</b>	(Largura a 10%) Mostra a largura do pico mensurado em 10% da altura do pico.	Número	N
<b>Width at 5%</b>	(Largura a 5%) Mostra a largura do pico mensurado em 5% da altura do pico.	Número	N
<b>Width at 50%</b>	(Largura a 50%) Mostra a largura do pico mensurado a meia altura.	Número	S
<b>XIC Width (Da)</b>	(Largura do XIC (Da)) Mostra a largura do cromatograma dos íons extraídos, em daltons.	Número	S
<b>XIC Width (ppm)</b>	(Largura do XIC (ppm)) Mostra a largura do cromatograma dos íons extraídos, em ppm (partes por milhão).	Número	S

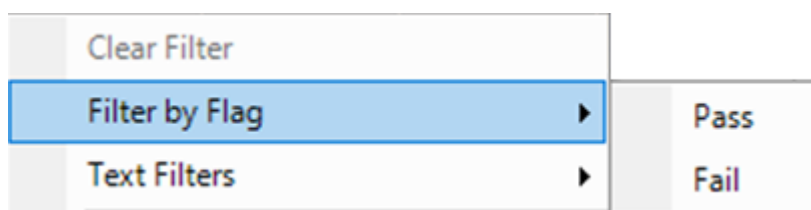


## Filtros de aceitação

Use a opção **Filter by Flag** no menu Filtro referente à coluna da Results Table para escolher se deve filtrar a coluna com base nos critérios de aceitação. A Results Table pode ser filtrada em critérios de aceitação, como a seguir:

- **Pass:** Mostra as linhas que correspondem aos critérios definidos no método de processamento.
- **Fail:** Mostra as linhas que não correspondem aos critérios definidos no método de processamento.

**Figura 6-26: Filtrar por marcador**



Os filtros de aceitação podem ser selecionados para qualquer coluna para a qual uma regra de marcador tenha sido aplicada, bem como os seguintes critérios de aceitação:

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Asymmetry Factor
- Calculated Concentration
- Concentration Acceptance
- Integration Acceptance
- Quality
- Retention Time Delta (min)
- Erro de tempo de retenção (%)
- Total Width

## Sinalizadores de confiança

Utilize o critério de aceitação para definir linhas de qualificação. Linha de qualificação é uma linha na qual os critérios de aceitação correspondem aos critérios definidos no método de processamento.

Figura 6-27: Linhas de qualificação

Define a qualifying row:

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

Os sinalizadores mostram o status de confiança para cada linha à qual a Regra qualitativa ou a Aceitação da proporção de íons é aplicada. Para obter informações sobre as regras de alerta, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

**Dica!** A Tabela de resultados pode ser filtrada usando os filtros do sinalizador de confiança. Marque a caixa de seleção **Qualify for Rules Filters** para alternar a vista da tabela de resultados entre as linhas que correspondem e as que não correspondem aos filtros de confiança. Os filtros de confiança incluem: Pass, Marginal, Fail e N/A.

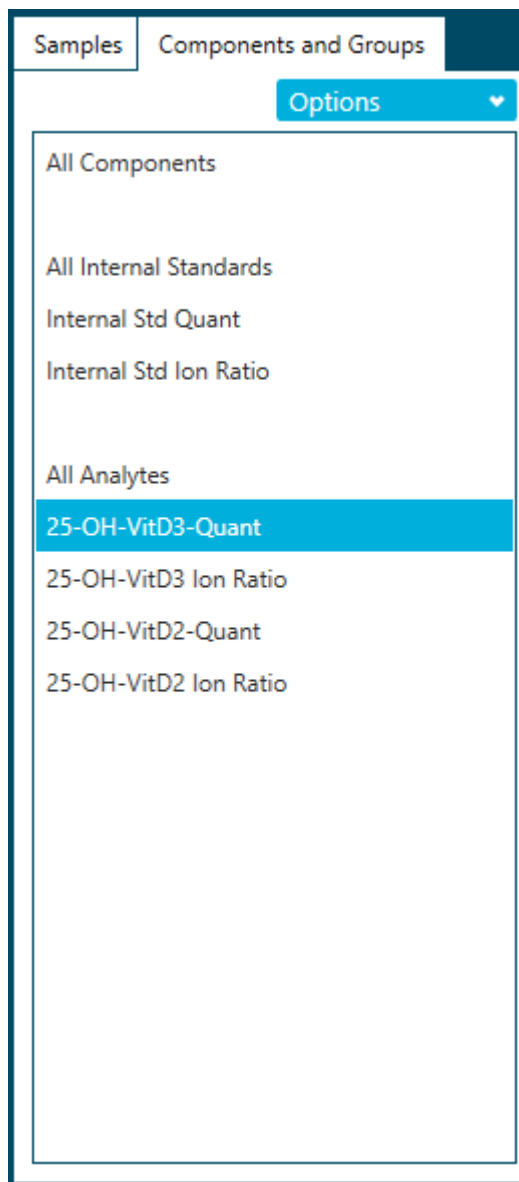
Tabela 6-6: Sinalizadores de confiança

Ícone Sinalizador	Descrição
	Exibe quais componentes estão de acordo com os níveis de confiança definidos no método de processamento.
	Exibe quais componentes estão em uma determinada margem percentual definida no método de processamento.
	Exibe quais componentes estão fora do percentual aceitável no método de processamento.
	Exibe quais parâmetros de confiança não são aplicáveis para o componente.

## Componentes e lista de grupos

Quando uma tabela de resultados é aberta, uma lista dos componentes e grupos atuais é exibida à esquerda da janela principal. Use essa lista para alterar quais componentes são visíveis nos resultados, assim como em qualquer painel Peak Review ou Calibration Curve conectado. Todas as informações são exibidas como se fossem definidas no método de processamento.

Figura 6-28: Components and Groups



Clique em um item individual na lista para exibir somente os componentes daquele item. Utilize **Shift+click** ou **Ctrl+click** para selecionar itens múltiplos, por exemplo, dois analitos específicos.

**Dica!** Altere a largura da lista arrastando a margem direita do painel para a esquerda ou direita.

A ordem das linhas na tabela de resultados não é afetada pelo filtro. A tabela é predefinida para ser solicitado primeiro pela amostra e depois pelo componente, seguindo a ordem indicada no método de processamento.

**Tabela 6-7: Opções**


Rótulo	Descrição
<b>Show IS</b>	(Mostrar IS) Clique para exibir as linhas na Results Table tanto para o analito atualmente selecionado como para o padrão interno correspondente. Isso equivale a clicar no analito e depois clicar no padrão interno enquanto pressiona a tecla <b>Ctrl</b> , de forma que ambos são selecionados.
<b>Find</b>	(Buscar) Clique para encontrar os itens da lista que correspondem com o texto específico.

## Revisão dos picos

### Procedimentos de pré-requisito

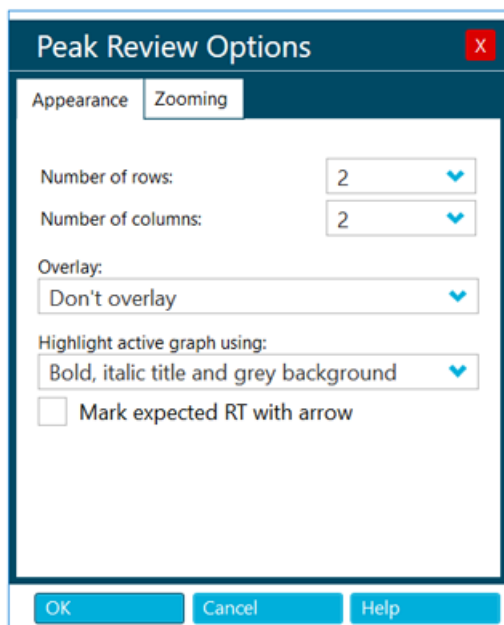
- Abra uma Tabela de resultados.


Utilize o painel Peak Review para:

- Inspeccionar visualmente os cromatogramas brutos para que a qualidade do processamento de confirmação do pico seja determinado.
  - Corrija os cromatogramas que não foram integrados corretamente, ajustando os parâmetros de confirmação do pico ou selecionando manualmente o início e pontos finais para integração. Após um cromatograma ser reintegrado, a tabela de resultados é atualizada automaticamente com a nova área do pico e outros parâmetros.
  - Inspeccione visualmente os espectros MS e MS/MS do XIC integrado.
  - Revise os resultados de localização de fórmulas e da pesquisa na biblioteca e, se necessário, atualize manualmente os resultados na tabela de resultados.
  - (Fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Inspecciona visualmente o espectro Average e o espectro Reconstruction.
  - (Fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Corrige cromatogramas em que a região XIC não foi selecionada adequadamente, ajustando os parâmetros de busca do pico ou selecionando manualmente a região XIC. Após uma nova região XIC ser selecionada, o espectro Average e o espectro Reconstruction são gerados novamente.
  - (Fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Corrige os picos de massa que não foram selecionados adequadamente ajustando os parâmetro Mass Peak Selection ou selecionando manualmente o pico de massa. Após o pico de massa ser alterado, a Tabela de resultados é atualizada automaticamente com o novo pico e outros parâmetros.
1. Clique em **Displays the peak review** ()
  2. Na lista **Components and Group** no painel esquerdo, selecione um componente.
  3. (Opcional) Personalize o layout do painel Peak Review com o menu **View**. Para obter uma descrição das opções de **View**, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

4. (Opcional) Clique em **Options > Peak review display settings** para alterar a aparência do painel Peak Review. Por exemplo, selecione o número de cromatogramas para visualizar de uma vez. Para obter descrições das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

**Figura 6-29: Caixa de diálogo Peak Review Options**



5. (Opcional) Para ampliar em um pico, use um dos seguintes métodos:
  - Clique em **Options > Peak review display settings** e, em seguida, clique em **Zooming** para alterar os parâmetros de ampliação dos picos.
  - Arraste o cursor sobre a região a ser ampliada no eixo X ou Y.
6. (Opcional) Para expandir um pico para preencher todo o painel Peak Review, selecione o pico e, em seguida, clique em **Peak magnifier** (  ).

---

**Dica!** Quando um ícone no painel Peak Review ficar preto, o recurso correspondente será habilitado. Para desabilitá-lo, clique no ícone novamente.

---

7. (Opcional) Para visualizar e ajustar a região de ruído no gráfico, clique em **Options > Show Noise Regions** e, em seguida, ajuste a região de ruído, se aplicável. Consulte a seção: [Trabalhe com regiões de ruído](#).

---

**Nota:** Regiões de ruído podem ser ajustadas somente se o algoritmo de sinal para ruído **Peak to Peak** ou **Standard Deviation** estiver sendo usado.


---

8. Se um cromatograma ou um gráfico de reconstrução que contém picos múltiplos e um pico incorreto é integrado, arraste através do pico correto para definir um novo tempo de retenção ou peso molecular esperado. Se necessário, ajuste os parâmetros de confirmação e integração do pico.


## Instruções de operação – Processamento

---


9. (Opcional) Para aplicar os novos parâmetros a todas as amostras do componente ou grupo de amostras, use as opções do menu do clique com o botão direito do mouse. Para obter mais informações, consulte a seção: [Trabalhe com picos no painel Peak Review](#).
- 

**Dica!** Para visualizar os picos integrados, clique em **Displays the peak review** (). No painel Peak Review, selecione **Options > Show navigation controls**. Em seguida, clique nos ícones de navegação. Para obter uma descrição dos ícones, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

---


**Dica!** Desmarque a integração clicando em **Set peak to "not found"** (). O usuário poderá ver os dados brutos antes de integrar o pico manualmente. Os parâmetros de integração não podem ser editados.

---


10. Clique no ícone **Enable manual integration mode** () no painel Peak Review para utilizar o modo Manual Integration.
11. Arraste o cursor da base de um lado do pico de interesse para o outro. O pico é integrado manualmente agora e os parâmetros de integração usados anteriormente não estão disponíveis.
- 

**Dica!** Se o pico tiver acabado de ser modificado, o pico poderá ser revertido para o método original clicando com o botão direito e, em seguida, clicando em **Revert Peak to Original Method**.

---

**Dica!** Para apagar a integração manual e habilitar os campos de parâmetro de integração, desmarque a caixa de seleção **Manual Integration** e, em seguida, clique em **Enable manual integration mode** () novamente.

---

12. (Opcional) Para mostrar o pico atual no espaço de trabalho Explorer, clique em **Open data exploration** ().

O nível de ampliação atual é preservado.

---

**Nota:** A integração manual de um pico persiste até que o usuário altere a integração para esse pico no painel Peak Review ou edite o método incorporado para alterar o componente.

---

**Nota:** No fluxo de trabalho de reconstrução de massa, se um pico de reconstrução de massa estiver manualmente integrado, a região XIC correspondente e o espectro médio persistem até que o usuário altere a integração para esse pico no painel Peak Review ou edite o método incorporado para alterar o componente.

---

## Trabalhe com picos no painel Peak Review

Tabela 6-8: Recursos do Peak Review

Para fazer isto	Faça isto
Copiar parâmetros de integração	<p>Use esse comando em conjunto com <b>Paste Integration Parameters</b> para copiar os parâmetros de confirmação do pico de um cromatograma para outro. Esse comando pode ser usado se o mesmo ajuste para os parâmetros precisar ser feito por diversos cromatogramas.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e, em seguida, clique em <b>Copy Integration Parameters</b>.</li> <li>2. Para aplicar a alteração a todos os cromatogramas para o componente, use o comando <b>Update Processing Method for Component</b>.</li> <li>3. Para aplicar a alteração a todos os cromatogramas para o grupo, use o comando <b>Update Processing Method for Group</b>.</li> </ol>
Colar parâmetros de integração	<p>Use esse comando em conjunto com <b>Copy Integration Parameters</b> para copiar os parâmetros de confirmação do pico de um cromatograma para outro.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e, em seguida, clique em <b>Copy Integration Parameters</b>.</li> <li>2. Clique com o botão direito em um cromatograma diferente e, em seguida, clique em <b>Paste Integration Parameters</b>.</li> </ol>
Atualize o método de processamento para um componente.	<p>Depois de ajustar os parâmetros de confirmação de pico para um cromatograma específico, use este comando para modificar a cópia do método de processamento salvo na tabela de resultados para usar esses parâmetros para o componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ajuste os parâmetros da busca por pico, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, selecione <b>Update Processing Method for Component</b>.</li> </ul> <p>Para o componente específico, todas as amostras são automaticamente integradas para usar os novos parâmetros, e o painel Peak Review e a tabela de resultados são atualizados. Se algum pico tiver sido manualmente integrado, o usuário deverá informar se a nova integração se aplica a todos os picos ou apenas aos que foram manualmente integrados.</p>

Tabela 6-8: Recursos do Peak Review (continuação)

Para fazer isto	Faça isto
<p>Atualize o método de processamento para um grupo.</p>	<p>(Não aplicável ao fluxo de trabalho mass reconstruction) Semelhante à opção <b>Update Processing Method for Component</b>, exceto que a integração se aplica a todos os componentes que pertencem ao mesmo grupo que o componente para o cromatograma ativo atualmente. Se o usuário tiver atribuído os diversos componentes aos grupos, e se os componentes atribuídos a determinado grupo precisarem ter o mesmo tempo de retenção, esse comando será útil, pois o usuário poderá redefinir os parâmetros, incluindo o tempo de retenção esperado, para todos os componentes do grupo de uma só vez. Esse comando não é útil se os componentes dos grupos não tiverem os mesmos tempos de retenção.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ajuste os parâmetros da busca por pico, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, selecione <b>Update Processing Method for Group</b>.</li> </ul>
<p>Atualize o método de processamento para um grupo, exceto <b>Expected MW</b></p>	<p>(Apenas o fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Semelhante à opção <b>Update Processing Method for Component</b>, exceto que a integração se aplica a todos os componentes que pertencem ao mesmo grupo que o componente para o cromatograma e gráfico de reconstrução ativos atualmente. Se o usuário tiver atribuído os diversos componentes aos grupos, e se os componentes atribuídos a determinado grupo precisarem ter o mesmo tempo de retenção e parâmetros de integração, esse comando será útil, pois o usuário poderá redefinir os parâmetros, incluindo o tempo de retenção esperado, para todos os componentes do grupo de uma só vez. Esse comando não é útil se os componentes dos grupos não tiverem os mesmos tempos de retenção. Esse comando não se aplica a <b>Expected MW</b>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ajuste os parâmetros da busca por pico e parâmetros de integração, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, selecione <b>Update Processing Method for Group, Excluding Expected MW</b>.</li> </ul>



Tabela 6-8: Recursos do Peak Review (continuação)

Para fazer isto	Faça isto
<p>Aplicar parâmetros de integração para a amostra dentro de um grupo</p>	<p>(Não aplicável ao fluxo de trabalho mass reconstruction) Após ajustar os parâmetros de busca por pico para um cromatograma específico, use este comando para aplicar os parâmetros a todos os compostos em uma amostra que pertence ao mesmo grupo do composto que foi alterado.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ajuste os parâmetros da busca por pico para o cromatograma, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, selecione <b>Apply integration parameters to sample within a group.</b></li> </ul>
<p>Aplicar parâmetros de integração para a amostra dentro de um grupo, exceto <b>Expected MW</b></p>	<p>(Apenas fluxos de trabalho Mass reconstruction) Após ajustar os parâmetros de busca de pico para um cromatograma específico e os parâmetros de integração para um gráfico de reconstrução, use este comando para aplicar os parâmetros a todos os compostos em uma amostra que pertence ao mesmo grupo do composto que foi alterado. Esse comando não se aplica a <b>Expected MW</b>.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ajuste a busca por pico para o cromatograma e os parâmetros de integração para o pico de massa deconvoluído, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, selecione <b>Apply integration parameters to sample within a group, excluding Expected MW.</b></li> </ul>
<p>Reverta um pico para o método original</p>	<p>Após ajustar os parâmetros de constatação do pico para um cromatograma específico, utilize esse comando para aplicar os parâmetros originais de uma cópia de método de processamento salva com a tabela de resultados no cromatograma.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e selecione <b>Revert Peak to Original Method.</b></li> </ul>

**Tabela 6-8: Recursos do Peak Review (continuação)**

Para fazer isto	Faça isto
Reverta todos os picos para um componente	<p>Após ajustar os parâmetros de confirmação do pico para alguns cromatogramas, utilize esse comando para aplicar os parâmetros originais de uma cópia do método de processamento salva na tabela de resultados a todos os cromatogramas do mesmo componente do cromatograma ativo. Se algum pico tiver sido manualmente integrado, o usuário deverá informar se a nova integração se aplica a todos os picos ou apenas aos que foram manualmente integrados.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e selecione <b>Revert All Peaks for Component</b>.</li></ul>

### Trabalhe com regiões de ruído

Se o algoritmo de sinal para ruído **Peak to Peak** ou **Standard Deviation** for usado, as regiões de ruído podem ser ajustadas interativamente na página Integration do método de processamento e do painel Peak Review.

1. Clique na região de ruído no gráfico e mova-a para a localização desejada.
2. Mova o cursor sobre a borda esquerda ou direita da região de ruído até que a seta de duas pontas seja exibida. Em seguida, arraste a borda para a posição desejada para ajustar o tamanho da região de ruído.

### Analisar picos usando a biblioteca de pesquisa ou os resultados do Formula Finder

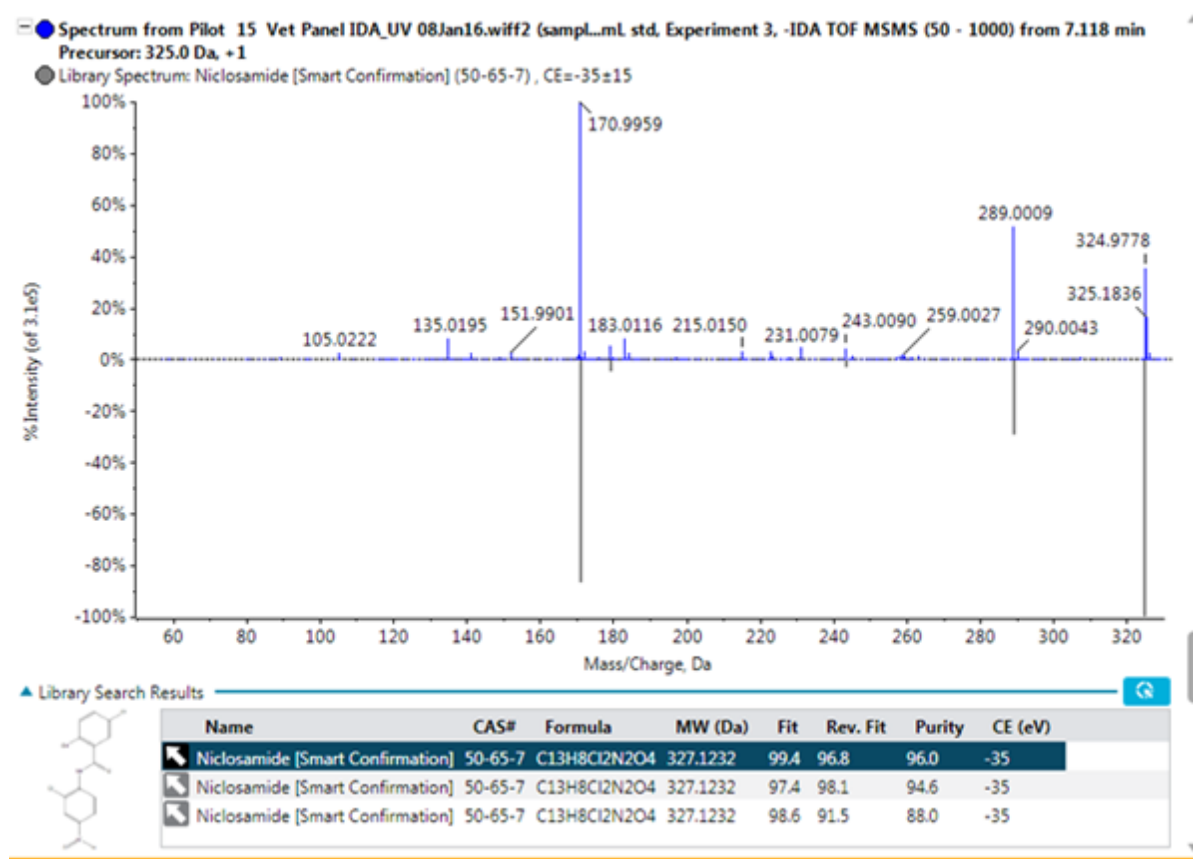
---



**Dica!** Clique em **Options > Peak review display settings** para alterar a quantidade de linhas mostradas no painel. Os usuários também podem arrastar e soltar o topo do painel para aumentar o tamanho do painel Peak Review.

---

1. Em um painel Peak Review, clique em **View**, depois clique em **XIC + MS**, **XIC + MS/MS** ou **XIC + MS + MS/MS**.  
Os resultados da pesquisa aparecem abaixo dos gráficos.

Figura 6-30: Resultados da biblioteca de pesquisa

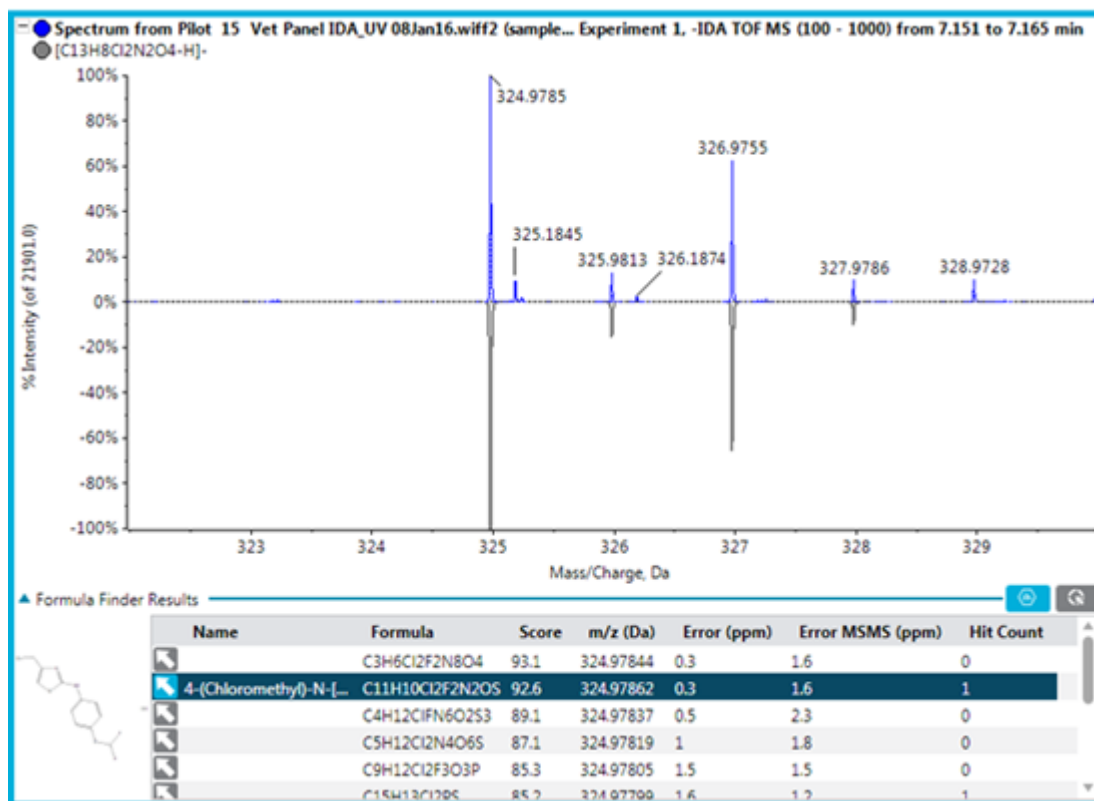


2. Clique na seta azul para expandir os **Library Search Results** e mostrar mais resultados da biblioteca possíveis.  
A estrutura química de resultados da biblioteca selecionada também aparece na tabela.
3. Clique novamente na seta para recolher a tabela.  
Os resultados que aparecem na tabela recolhida também aparecem na tabela de resultados.
4. (Opcional) Selecione uma linha na tabela, depois clique em  para atualizar os resultados na Table Results e usar esse resultado específico da biblioteca na análise.
5. (Opcional) Clique em  para atualizar o método de processamento com as informações do composto selecionado.
6. Para adicionar um espectro ao banco de dados da biblioteca, siga as seguintes etapas:
  - a. Clique com o botão direito do mouse no espectro e, em seguida, clique em **Add spectrum to library**.  
A caixa de diálogo Add spectrum to library será aberta.
  - b. Atualize os campos **Compound Name**, **Library** e **Precursor m/z**.
  - c. Clique em **OK**.



## Instruções de operação – Processamento

7. Clique na seta azul para expandir os **Formula Finder Results** e mostrar mais resultados possíveis.


**Figura 6-31: Formula Finder Results**



A estrutura química dos resultados selecionados do Formula Finder também aparece na tabela caso o composto tenha sido atualizado no ChemSpider.

8. Clique novamente na seta para recolher a tabela. Os resultados que aparecem na tabela recolhida também aparecem na tabela de resultados.
9. Clique em  para atualizar a coluna **Formula Finder Results** na Tabela de resultados com o composto selecionado.
10. Clique em  para atualizar o método de processamento com as informações do composto selecionado.

**Dica!** Clique em **Options > Get Chemspider hit count** para exibir a coluna **ChemSpider Hit Count** na tabela abaixo do gráfico.

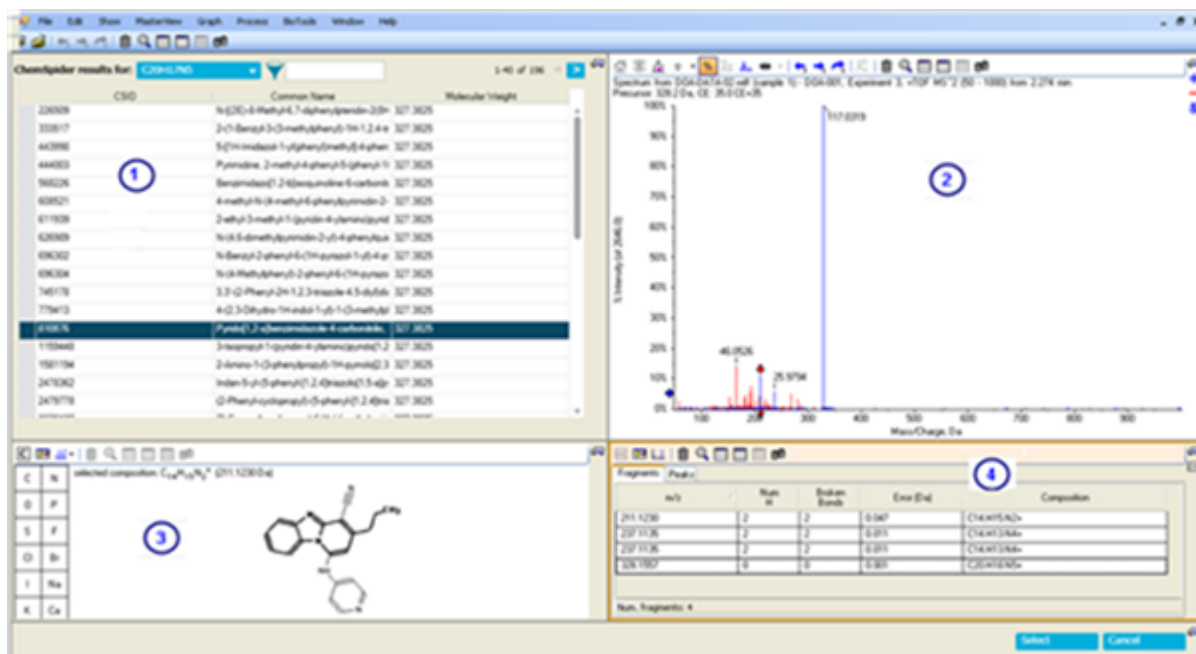
11. Clique em  para abrir o aplicativo ChemSpider. Consulte a seção: [ChemSpider](#).

## ChemSpider

**Nota:** A estação de trabalho deve conter um arquivo de licença válido para acessar o banco de dados do ChemSpider.

**Nota:** As informações da imagem a seguir são apenas exemplos.

Figura 6-32: Sessão do ChemSpider



Item	Descrição
1	Resultados pane: mostra uma lista de compostos sugeridos que correspondem à fórmula selecionada. Os resultados são mostrados em grupos de 40 compostos. Use a seta para a direita para avançar ao próximo grupo na lista. Use a seta para a esquerda para voltar ao grupo anterior na lista.
2	Painel Spectra: mostra os espectros adquiridos (em vermelho) e os fragmentos correspondentes (em azul). Mais fragmentos em azul indicam uma correspondência melhor.
3	Painel Structure: mostra a estrutura química do composto selecionado no painel de resultados.
4	Painel de tabela de fragmentos, guia Fragments: mostra o número total de fragmentos correspondentes para o composto selecionado.

## Instruções de operação – Processamento

Item	Descrição
4	Painel de tabela de fragmentos, guia Peaks: mostra o número total de picos, o número de picos correspondentes e a % da intensidade total para o composto selecionado. A caixa de seleção na coluna <b>Assigned</b> fica marcada automaticamente para os picos correspondentes.

**Tabela 6-9: Recursos ChemSpider**

Quando você faz isto...	... isto acontece
Digite as informações no campo ao lado do ícone <b>Filter XIC List</b>	O painel de resultados é atualizado e contém apenas os resultados que correspondem aos critérios inseridos.
Clicar nas entradas do painel de resultados	Os painéis restantes são atualizados, mostrando as informações associadas à seleção.
Clicar nas entradas na guia Fragments do painel da tabela de fragmentos	Os painéis restantes são atualizados. No painel de espectros, as setas vermelhas aparecem nas partes superior e inferior do segmento correspondente (em azul). No painel de estrutura, os componentes da estrutura química que correspondem ao fragmento são realçados (em negrito).
Clique nas entradas da <b>Assigned</b> na guia Peaks do painel da tabela de fragmentos	Os painéis restantes são atualizados. No painel de espectros, as setas vermelhas aparecem nas partes superior e inferior do segmento correspondente (em azul). No painel de estrutura, os componentes da estrutura química que correspondem ao fragmento são realçados (em negrito).
Clique na seta para baixo à direita do campo <b>ChemSpider results for</b> e selecione a opção <b>ChemSpider web site</b>	O site do ChemSpider ( <a href="http://www.chemspider.com">www.chemspider.com</a> ) abre na janela do navegador. Consulte o ChemSpider Help para saber como acessar informações.
Clique na seta para baixo à direita do campo <b>ChemSpider results for</b> e selecione a opção <b>Refresh</b>	Todas as alterações são descartadas, e a sessão volta aos resultados originais da pesquisa.
Clique em <b>Select</b>	As informações selecionadas na sessão do ChemSpider são copiadas no painel Formula Finder Results, na sessão do software. A sessão do ChemSpider é fechada.

## Dicas do painel Peak Review

- Ordene a tabela de resultados em uma coluna específica e revise somente os cromatogramas que são ordenados no topo ou na base da tabela.

- O painel Peak Review sempre está sincronizado com sua Results Table correspondente e mostra os cromatogramas para os mesmos picos, na mesma ordem, como na Results Table. Quaisquer alterações, como ordenar linhas, filtrar tipos de amostra ou selecionar quaisquer componentes, feitas à tabela de resultados são refletidas automaticamente no painel Peak Review.
- Use a barra de rolagem à direita do painel para rolar pelos cromatogramas disponíveis. Quando o painel Peak Review está ativo, use as setas para cima e para baixo no teclado ou a roda de rolagem do mouse para mover pelos cromatogramas.
- Selecione uma linha na tabela de resultados clicando na região azul-claro à esquerda da primeira coluna para mostrar o pico correspondente no painel Peak Review. Se o usuário rolar para um cromatograma específico no painel Peak Review, a tabela de resultados realça a linha correspondente e torna-a visível.
- O agrupamento de números não é suportado no espaço de trabalho Analytics. Os usuários não devem agrupar números em qualquer caixa de texto, por exemplo, parâmetros de integração, e grade, por exemplo, Results Tables.
- A qualquer momento, um cromatograma é considerado ativo e é indicado pelo título em negrito. Ative um cromatograma clicando em qualquer lugar dentro dele.

---

**CUIDADO: Potencial perda de dados. Tome cuidado para não arrastar o cursor em um cromatograma, pois isso ajusta o tempo de retenção esperado e causa alterações na integração.**

---

- Se o usuário arrastar um pico específico em um cromatograma, o parâmetro de integração **Expected RT** é atualizado com o tempo de retenção real do pico. O novo tempo de retenção é automaticamente aplicado e o software integra o pico novamente, atualizando a Results Table corretamente.
- (Fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Se o usuário arrastar ao longo do pico específico em um gráfico de reconstrução, o parâmetro **Expected MW** será atualizado com o peso molecular real do pico. O novo peso molecular é automaticamente aplicado e o software integra o pico novamente, atualizando a Results Table corretamente.
- (Fluxo de trabalho Mass Reconstruction) Se **Recentered on the largest XIC Peak** não estiver selecionado, o usuário poderá selecionar manualmente a região XIC desejada. O tempo no centro da região XIC torna-se o RT esperado, e o RT do maior pico dentro da região XIC torna-se o RT encontrado.
- Se o usuário estiver revisando picos no modo de integração manual, arrastar o cursor entre o pico integrará manualmente o pico selecionado. Manter **Shift** pressionado enquanto arrasta ajuda a manter a linha reta.
- Quando um cromatograma torna-se ativo, os parâmetros de integração exibidos à esquerda do painel são atualizados para refletir o cromatograma ativo recentemente. Se o usuário ajustar os parâmetros de integração do pico e clicar em **Apply**, o cromatograma ativo será afetado.
- Os usuários devem inspecionar a forma do pico durante a revisão de picos para identificar possíveis picos saturados e garantir que a integração parcial ou incorreta não resulte erroneamente em concentrações relatadas de forma errada.

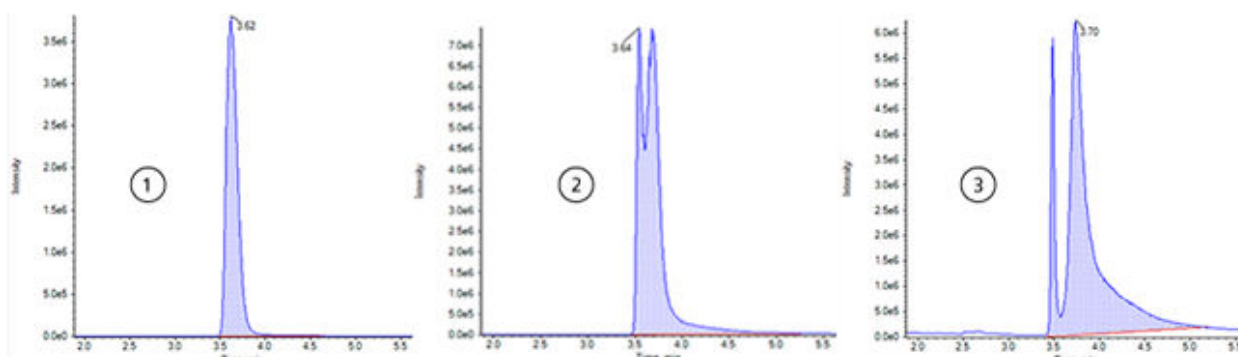
## Instruções de operação – Processamento

- Os usuários devem inspecionar os cromatogramas durante a revisão de picos para saber se há presença excessiva de picos ruidosos que possam indicar problemas no sistema.
- Clique duas vezes no eixo Y para medir o eixo no pico mais intenso dentro de todo o conjunto de dados. Aumente o zoom arrastando o eixo para selecionar um intervalo de intensidade.
- Clique duas vezes no eixo X para retornar o gráfico à sua exibição original em que todos os dados ficam visíveis. Aumente o zoom arrastando o eixo para selecionar um intervalo de tempo.
- Ao navegar amostra por amostra na Results Table, clique em **Results > Cache all chromatograms for faster peak review** para melhorar o desempenho.

Amostras de concentrações extremamente altas, bem acima do limite máximo de quantificação, ou ULOQ, podem gerar picos muito mais amplos e saturados, com formas distorcidas ou divididas.

A figura a seguir mostra a concentração máxima que pode ser quantificada usando a regressão linear.

**Figura 6-33: Exemplos de picos saturados e não saturados**



Item	Descrição
1	Mostra um pico aceitável que pode ser usado para quantificação.
2	Mostra um pico que está saturado. A concentração da amostra que gerou este pico está bem acima do ULOQ. Conforme o pico fica saturado, ele se torna mais amplo, e o topo do pico é invertido devido à supressão de ganho. Um pico assim deve ser excluído da quantificação, porque a integração parcial pode resultar em concentrações incorretamente relatadas.
3	Mostra a saturação extrema que resulta no pico LC se separando em dois picos. Um pico assim deve ser excluído da quantificação, porque a integração parcial pode resultar em concentrações incorretamente relatadas.



## Analisar dados usando funções estatísticas

### Procedimentos de pré-requisito

- Abra uma Tabela de resultados.

Use o painel Statistics para ver informações relacionadas à reprodutibilidade de uma análise. Cada linha da tabela resume informações como a média e o desvio padrão de um grupo de picos relacionados, a partir do mesmo analito, dos quais se espera ter a mesma resposta.

Revise a integração de pico, a curva de calibração e as funções estatísticas calculadas da amostra usando um processo iterativo. A precisão definida para o campo **Actual Concentration**, na tabela de Resultados, é usada também na tabela de estatísticas.

**Nota:** Consulte os procedimentos operacionais do laboratório para obter informações sobre os valores aceitos para os cálculos estatísticos, incluindo %CV e precisão.

Abra uma tabela de resultados e clique em no painel **Views > Statistics pane**.

### Colunas do painel Statistics

Rótulo	Descrição
<b>Row</b>	(Linha) Mostra o número da linha.
<b>Component Name</b>	(Nome do componente) Mostra o nome do analito.
<b>Sample Name/ Actual Concentration</b>	(Nome da amostra/Concentração real) Quando as amostras são agrupadas pela concentração real, mostra a concentração. Quando as amostras são agrupadas pelo nome, mostra o nome da amostra.
<b>Num. Values</b>	(Valores núm.) Mostra $m$ de $n$ , em que $n$ é o número total de amostras na concentração real, ou com o mesmo nome da amostra, e $m$ é o número dessas amostras usadas para os cálculos. As amostras não são usadas quando o pico correspondente não pôde ser integrado ou quando o campo <b>Used</b> foi apagado manualmente.
<b>Mean</b>	(Média) Mostra a média das amostras usadas.
<b>Standard Deviation</b>	(Desvio padrão) Mostra o desvio padrão das amostras usadas.
<b>Percent CV</b>	(CV percentual) Mostra o coeficiente de variação expressa como porcentagem: $100 * Standard\ Deviation / Mean$ .
<b>Accuracy</b>	(Precisão) Mostra o valor médio dividido pela concentração real, expresso como porcentagem: $100 * Mean / Actual\ Concentration$ . Este campo é mostrado apenas ao agrupar por concentração real, não por nome da amostra.

## Instruções de operação – Processamento

---

Rótulo	Descrição
Values	(Valores) Mostra os valores individuais para as amostras em colunas adicionais. Se a amostra correspondente não for integrada, <b>N/A</b> aparecerá. Se o campo <b>Used</b> tiver sido apagado manualmente, o valor será mostrado como uma linha marcada.
Group by	(Agrupar por) Especifica como a amostra de determinado analito deve ser agrupada para o cálculo das estatísticas. As seguintes opções estão disponíveis: <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Group by Concentration for Standards</b> (Agrupar por concentração para padrões): amostras padrão são agrupadas pela concentração real.</li><li>• <b>Group by Concentration for QCs</b> (Agrupar por concentração para QCs): amostras de controle de qualidade são agrupadas pela concentração real.</li><li>• <b>Group by Sample Name for Standards</b> (Agrupar por nome da amostra para padrões): amostras padrão replicadas são agrupadas pelo campo <b>Sample Name</b>.</li><li>• <b>Group by Sample Name for QCs</b> (Agrupar por nome da amostra para QCs): amostras do controle de qualidade replicadas são agrupadas pelo campo <b>Sample Name</b>.</li><li>• <b>Group by Sample Name for All Samples</b> (Agrupar por nome da amostra para todas as amostras): todas as amostras replicadas são agrupadas pelo campo <b>Sample Name</b>.</li></ul>
Métrica	Especifica a métrica real que é usada para o cálculo das estatísticas. As seguintes opções estão disponíveis: <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Calculated Concentration</b> (Concentração calculada): o campo <b>Calculated Concentration</b> da Results Table é usado.</li><li>• <b>Area</b> (Área): o campo <b>Area</b> da Results Table é usado.</li><li>• <b>Height</b> (Altura): o campo <b>Height</b> da Results Table é usado.</li><li>• <b>Calibration Y-Value</b> (Valor Y da calibração): o parâmetro de regressão especificado para o analito é usado. Pode ser <b>Area</b> ou <b>Height</b> para um analito que não tem um padrão interno correspondente, ou <b>Area Ratio</b> ou <b>Height Ratio</b> para um analito que usa um padrão interno.</li></ul>
Save Results and Export	(Salvar resultados e exportar) Clique para salvar os resultados e exportar a tabela de estatísticas. A caixa de diálogo Export Statistics será aberta.

## Dicas do Statistics Pane


- Na lista **Components and Groups**, selecione **All Components** para visualizar as entradas para todos os analitos na tabela Statistics. Selecione um componente individual para visualizar as entradas somente para aquele analito. Se o usuário selecionar um padrão interno individual da lista, então a tabela Statistics estará vazia. Consulte a seção: [Componentes e lista de grupos](#).
- Clique em uma das células **Value** para uma linha que esteja visível no Statistics pane para selecionar a linha correspondente na Tabela de resultados para o analito e a amostra. Se o painel Peak Review estiver visível, ele se liga à tabela de resultados e é atualizado quando se clica na célula correspondente.
- Classifique as estatísticas clicando em um dos cabeçalhos de colunas.
- Copie toda a tabela Statistics ou apenas as linhas de interesse selecionando as linhas e, em seguida, pressionando **Ctrl+C**.
- Use a lista **Group by** para especificar como a amostra, para um analito fornecido, deve ser agrupada para o cálculo das estatísticas.
- Use a lista **Metric** para especificar a métrica que é usada para cálculo das estatísticas, concentração calculada, área e assim por diante.
- Ajuste as larguras da coluna para otimizar a exibição. Essas larguras são preservadas na próxima vez que o Statistics pane for mostrado.
- Para alterar o formato e a precisão da tabela Statistics, altere-os na Tabela de resultados. Consulte a seção: [Personalize a Results Table](#).
- Para alterar a opção **Use Peak** para um valor individual, clique com o botão direito na célula no Statistics pane e selecione **Use Peak**. A coluna **Use Peak** na Tabela de resultados é atualizada.

## Exibir a curva de calibração

Procedimentos de pré-requisito
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Abra uma Tabela de resultados.</li> </ul>



Use a curva de calibração para determinar a concentração de uma substância em uma amostra desconhecida por comparação da amostra desconhecida com um grupo de amostras padrão de uma concentração conhecida. Consulte a seção: [Curvas de calibração](#).

1. Clique em **Displays the Calibration Curve** ()
2. Para definir as opções de regressão, clique em **Regression**. Consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

## Exportar calibração

Use Export Calibration para salvar uma cópia da equação da calibração para todos os analitos associados com a Results Table ativa em um arquivo externo (mqcal). O que

## Instruções de operação – Processamento

---

permite ao usuário aplicar a calibração de um conjunto das amostras padrões para outras amostras que não são parte da mesma tabela de resultados.

O fluxo de trabalho típico é:

1. Crie uma Results Table que contenha somente o padrão.
2. Use o painel Peak Review para ter certeza de que a integração foi bem sucedida.
3. No painel Calibration Curve, clique em **Options > Export calibration (and save results)** para salvar uma cópia da calibração.
4. Crie uma nova tabela de resultados que contenha amostras de uma concentração desconhecida.
5. No painel Calibration Curve, clique em **Options > Assign external calibration** para aplicar a equação de calibração exportada para a nova Results Table.

---

**Nota:** Os usuários também podem especificar o arquivo de calibração (mqcal) para aplicar à nova Results Table.

---

Se alterações forem feitas para a Results Table original, com as amostras padrões, então a Results Table deve ser exportada novamente para salvar a equação de calibração atualizada. As calibrações exportadas anteriormente não são atualizadas automaticamente.

## Analisar dados com gráficos métricos

<b>Procedimentos de pré-requisito</b>
---------------------------------------

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• Abra uma Tabela de resultados.</li></ul> |
|--|

Use um Metric Plot para representar graficamente os valores em uma coluna da tabela de resultados em relação ao número da linha ou uma outra coluna. Esses traços são um auxílio valioso para revisão de dados visualmente.

Se uma coluna for selecionada, o gráfico resultante mostrará os valores da coluna em função do número de linha na tabela. Se duas colunas forem selecionadas, então os valores das colunas serão representados graficamente um em relação ao outro. A primeira das duas colunas a serem selecionadas contém o valor X e a segunda contém o valor Y.

1. Selecione uma ou duas colunas na Tabela de resultados.

---

**Dica!** Para selecionar uma segunda coluna, pressione **Ctrl** enquanto clica no cabeçalho da coluna.

---

2. Clique em **More > Create Metric Plot with new settings**.
3. No Gráfico de métrica, clique em **Link**, depois em **Link to results table columns** ou **Link to results table rows** para vincular a rolagem da Tabela de resultados ao Gráfico de métrica.

Para obter mais informações sobre o menu **Link**, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

4. Para atualizar o Gráfico de métrica, selecione as linhas de interesse na Tabela de resultados e, em seguida, no painel Gráfico de métrica, clique em **Link > Plot selected rows only**.

---

**Dica!** Para selecionar várias linhas, pressione **Ctrl** enquanto as seleciona.

---

5. (Opcional) Personalize as opções do Gráfico de métrica selecionando opções no menu **Options**. Para obter descrições das opções, consulte o documento: *Sistema de ajuda*.

### Dicas sobre o gráfico de métricas

- Se os usuários clicarem com o botão esquerdo em um ponto de dados, a linha correspondente da Results Table será automaticamente selecionada e aparecerá na rolagem da visualização. Se o painel Peak Review estiver aberto, ele também será atualizado para mostrar o cromatograma correspondente. Esse é um método conveniente de fazer uma revisão de pico para os valores discrepantes.
- A região do título sempre exibe o nome do traço ativo. Se os traços para vários componentes forem sobrepostos, altere o título entre mostrar as informações para todos os traços ou apenas o que está ativo clicando no sinal de somar (+) à esquerda do título. Ative um traço específico clicando no título ou no ponto colorido à esquerda do título correspondente ou selecionando um ponto de dados no Gráfico de métrica.
- O Gráfico de métrica pode ser usado para representar áreas de pico de amostras do padrão ou QC internas, a fim de monitorar possíveis desvios ou tendências.

## Editar modelos de relatório

---

**CUIDADO: Potencial perda de dados. Para impedir que os usuários modifiquem os modelos, certifique-se de que os modelos do Reporter estejam localizados em pastas seguras (somente leitura), que só podem ser editadas pelos administradores do sistema.**

---

O usuário é responsável por validar o modelo personalizado.

1. Abra o modelo docx.

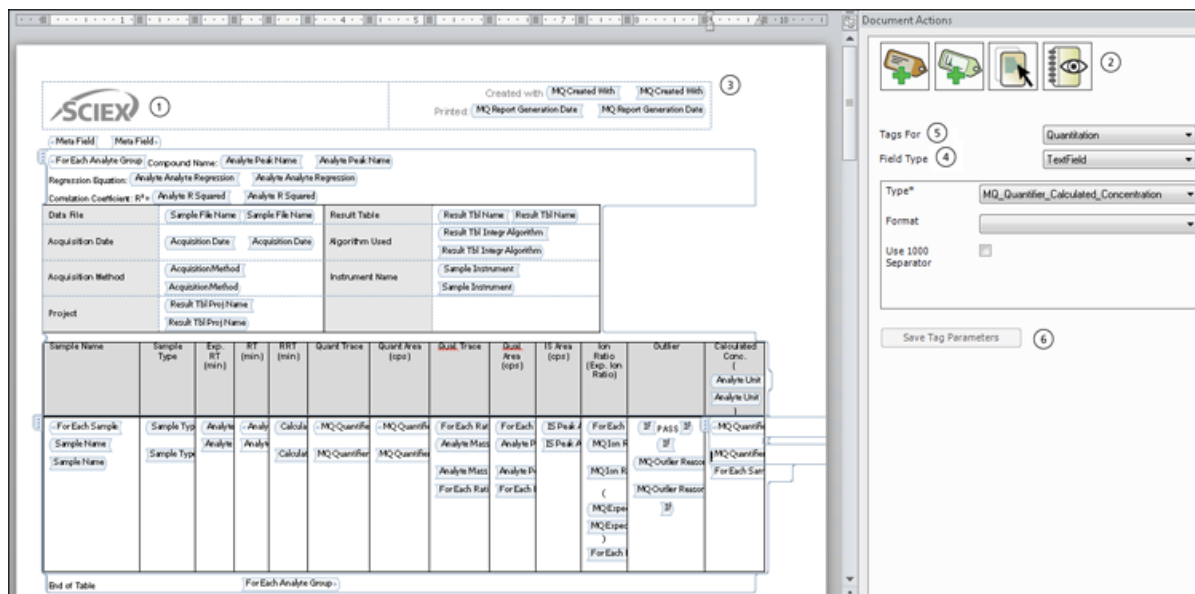
---

**Dica!** Os modelos estão localizados em  
C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter.

---

Quando uma área é selecionada, o editor de modelo Reporter é aberto à direita. O editor de modelo é automaticamente preenchido com as informações da etiqueta.

Figura 6-34: Editor de modelo Reporter



Item	Descrição
1	Modelo de relatório exibindo as etiquetas ativas.
2	Ícones: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Adicionar nova etiqueta.</li> <li>• Adicionar etiqueta de imagem.</li> <li>• Mostrar área de conteúdo.</li> <li>• Exibir log de alterações do documento.</li> </ul>
3	<b>Created with:</b> exibe o nome do software, fornecendo as informações de tag.
4	<b>Field Type:</b> exibe os tipos de campo aplicáveis ao software.
5	Mostra uma lista de atributos disponíveis com base no tipo de filtro selecionado. Por exemplo, nome da etiqueta e formato de número.
6	<b>Save Tag Parameters:</b> clique para salvar as alterações. Se as alterações não forem salvas, aparecerá uma mensagem pedindo que o usuário as salve.

2. Use os procedimentos da tabela a seguir.

Tabela 6-10: Funções do Reporter

Para fazer isto	Faça isto
Alterar o tipo de campo.	Clique dentro da guia, selecione um novo tipo de campo e selecione os atributos.

**Tabela 6-10: Funções do Reporter (continuação)**

Para fazer isto	Faça isto
Alterar os atributos do tipo de campo.	Clique na guia e altere os atributos, conforme desejado.
Adicionar uma etiqueta.	Clique no ícone <b>Add new tag</b> , selecione o tipo de campo e depois selecione os atributos.
Adicionar uma imagem.	Clique no ícone <b>Add picture tag</b> e selecione os atributos.
Mostrar onde começa e termina uma etiqueta.	Clique no ícone <b>Show content area</b> .
Mostrar o registro de alterações do documento.	Clique no ícone <b>View document change log</b> .
Copiar e colar etiquetas.	Copie as etiquetas selecionadas e então cole-as no novo local. Atualize os atributos de tipo de campo.  Os atributos não são copiados e devem ser selecionados.
Navegar entre as etiquetas.	Use as teclas de setas esquerda e direita para passar entre as etiquetas.
Excluir etiquetas.	Escolha uma das seguintes opções: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Se o cursor estiver à esquerda da tag, pressione <b>Delete</b>.</li> <li>• Se o cursor estiver à direita da tag, pressione <b>Backspace</b>.</li> </ul>

3. Clique em **Save Tag Parameters** depois de fazer alterações.

---

**Dica!** As informações obrigatórias são indicadas por um sinal de exclamação que pisca em vermelho à esquerda do campo.

---

## Modelos de relatório

O usuário tem a responsabilidade de validar o modelo de relatório personalizado.

Alguns modelos de relatório usam consultas. Os usuários podem criar consultas usando fórmulas baseadas no Microsoft Excel para avaliar, manipular e apresentar os dados da tabela de resultados em um relatório. A tag Metafield no modelo de relatório informa ao relatório o nome do arquivo de consulta que ele deve usar. Para usar consultas, o nome do arquivo de consulta deve ser especificado na tag MetaField no modelo de relatório. As consultas também devem ter a extensão “.query” para ser reconhecida como uma consulta. As consultas devem ser armazenadas na pasta Reporter em que os modelos de relatório estão armazenados.

Recomenda-se que o usuário valide os resultados gerados quando um modelo Reporter for usado, especialmente quando consultas forem usadas em um modelo. Se quaisquer modificações forem feitas no modelo de relatório após a validação, o modelo de relatório

## Instruções de operação – Processamento

deverá ser revalidado. Mudanças no modelo de relatório incluem qualquer modificação a rótulos ou consultas do relator.

**Tabela 6-11: Modelos padrão**

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
All Peaks Qual	Um relatório que exibe, para cada amostra, uma seção que inclui File Information, Sample Information, Analyte Results Table e cromatogramas sobrepostos de todos os analitos e padrão interno. A Results Table do analito é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela.	N/A
Analyte 20 percent Report	Relatório que mostra, para cada analito, uma seção incluindo Informações do arquivo e uma tabela XIC para cada Blank, Standard, QC e 20% de todos os Unknowns.	Este é um exemplo de modelo de relatório que possui uma Consulta anexada - Analyte20percent.Query.
Analyte Summary	Results Table que mostra o Nome da amostra, as Concentrações calculadas e os Valores discrepantes para todas as amostras no lote para o analito específico e o Padrão interno associado.	N/A
Calibration Curve	Um relatório que mostra File Information, Statistics Table (standards) e Calibration Curve para analitos em uma página por analito.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Padrões para os quais a caixa de seleção Reportable está desmarcada não serão reportados na tabela de dados. As estatísticas não serão afetadas pelo status Reportable.</li><li>• O relatório exibirá a equação e o gráfico de regressão, conforme mostrado e calculado no painel Calibration Curve no espaço de trabalho Analytics, com base na coluna <b>Used</b>.</li></ul>



Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
Intact Quant All Peaks and Graphs	Um relatório que mostra as entradas da Results Table para cada amostra. Todas as colunas visíveis na Results Table são exibidas no relatório. O relatório também inclui o cromatógrafo XIC, espectro médio e espectro de reconstrução, para cada amostra e analito.	Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction.
Intact Quant Analyte Summary and Calibration Curve	Um relatório que mostra as entradas da Results Table, a curva de calibração e os dados estatísticos para cada analito. A Results Table inclui o Nome da amostra, o Tipo de amostra, o Nome do analito, a Concentração real, a Área, a Altura, MW, MW, MW Delta esperados, a Concentração calculada e a Precisão.	Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction.
Intact Quant Sample Summary	Um relatório que mostra as entradas da Results Table para todas as amostras. A Results Table inclui o Nome da amostra, o Tipo de amostra, o Nome do analito, a Concentração real, a Área, a Altura, MW, MW, MW Delta esperados, a Concentração calculada, a Precisão e a Aceitação da precisão.	Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction.
Metric Plot	Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as File Information e um gráfico métrico da área do pico do analito.	O estado da caixa de seleção <b>Reportable</b> não afeta o conteúdo do relatório. Todos os pontos de dados são incluídos mesmo se as caixas de seleção estiverem desmarcadas.

## Instruções de operação – Processamento

**Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)**

<b>Modelo</b>	<b>Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)</b>	<b>Observações adicionais</b>
MQ Analyte Report 1	Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo, a Results Table da amostra e a Tabela XIC para cada amostra - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR ANALITO PARA < 8 AMOSTRAS	N/A
MQ Analyte Report 2	Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo e a Tabela XIC para cada amostra desconhecida - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR ANALITO PARA < 8 AMOSTRAS	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Analyte Report 3	Relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo e uma Tabela de resumo de amostras desconhecidas.	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Analyte Report condensed table	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. A tabela é exibida como 2 colunas para que caibam mais analitos por página.	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Analyte Report with chromatograms	Relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo, uma tabela de resultados de amostra e um pequeno cromatograma para cada amostra.	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Blank Template	N/A	Somente informações do cabeçalho, a logo e os números das páginas são exibidos no relatório.

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
MQ Pep Quant	N/A	Para uso com o conjunto de dados Peptide Quantitation. Consulte o segundo exemplo, o exemplo de quantificação absoluta, no <i>Guia do usuário</i> para o software MultiQuant.
MQ QC Summary 1 with flags	Um relatório que mostra Informações de arquivo, tabela de resumo QC por analito (valores com um CV mais alto que 20% são destacados) e a tabela de resultados detalhados QC (valores com uma precisão fora de 80-120% são destacados).	Controles de qualidade com a caixa de seleção <b>Reportable</b> desmarcada não serão incluídos no relatório nem serão usados nos cálculos.
MQ Sample Report 1	Um relatório que mostra, para cada exemplo, uma seção que inclui Informações do arquivo, Informações da amostra, Informações IS, Results Table do analito, Tabela XIC incluindo IS e cada analito - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 AMOSTRAS	N/A
MQ Sample Report 2	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, TIC, Detalhes da amostra, XIC do analito e os resultados em forma de tabela - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 AMOSTRAS	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Sample Report 3	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados.	Somente desconhecidas são reportadas.

## Instruções de operação – Processamento

---

**Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)**

<b>Modelo</b>	<b>Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)</b>	<b>Observações adicionais</b>
MQ Sample Report condensed table	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. A tabela é exibida como 2 colunas para ajustar mais analitos por página.	Somente desconhecidas são reportadas.
MQ Sample Report with chromatograms	Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui informações do arquivo, informações de amostra, tabela de resultados de analitos e um pequeno cromatograma para cada analito.	Somente desconhecidas são reportadas.

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
MQ Sample Report with Concentration Threshold	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, Informações de amostra e a Soma dos resultados.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• O arquivo de consulta associado é Sample Report com Concentration Threshold.query.</li> <li>• Os componentes devem ser nomeados como "Cmpd X #", em que X é qualquer caractere de A a F, e # é qualquer valor numérico.   <b>Exemplo:</b> no relatório, um componente chamado "Cmpd A 1" será exibido sob o título <b>Compound Group A</b>; um componente chamado "Cmpd B 1" será exibido sob <b>Compound Group B</b> e assim por diante.</li> <li>• Se os componentes estiverem no mesmo grupo, somente o primeiro componente do grupo, alfabeticamente, será incluído no relatório.   <b>Exemplo 1:</b> se "Cmpd B 25" e "Cmpd C 1" pertencerem a grupo "Grp", o "Cmpd C 1" não estará no relatório.   <b>Exemplo 2:</b> se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" não forem atribuídos aos grupos, "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" não estarão no relatório.   <b>Exemplo 3:</b> se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" forem atribuídos aos grupos 1, 2 e 3, respectivamente, os 3 componentes estarão no relatório sob o título <b>Compound Group A</b>.</li> </ul>

**Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)**

<b>Modelo</b>	<b>Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)</b>	<b>Observações adicionais</b>
MQ Sample Report with MRM ratios 2	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção incluindo Informações do arquivo, Informações de amostra, uma Tabela de resumo de resultados e uma sobreposição de todos XIC. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9.	N/A

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
MQ Sample Report with MRM ratios EU	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora do esperado (usando diretrizes EU para tolerâncias de proporção) são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9.	O arquivo de consulta associado é <code>MRM ratios EU.query</code> .
MQ Sample Report with MRM ratios MQ EFAB 03	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9.	N/A

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
MQ Sample Report with MRM ratios	Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9.	O arquivo de consulta associado é <code>MRM ratios.query</code> .
MQ Sample Report with standards, QC, and blanks	Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui Informações do arquivo, Tabela de resumo de padrões, Tabela de resumo QC, Results Table em branco; em seguida, para cada amostra desconhecida, uma seção incluindo Informações do arquivo, Informações da amostra, Informações IS, Results Table do analito, Tabela XIC incluindo IS e cada analito - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 ANALITOS.	Padrões e Controles de qualidade com a caixa de seleção <b>Reportable</b> desmarcada não serão exibidas em suas respectivas tabelas de resumo no relatório nem serão usadas nos cálculos estatísticos.
MQ Tutorial Dataset Heavy Light	N/A	Esse relatório destina-se para uso com o conjunto de dados Tutorial Dataset Heavy Light. Consulte o segundo exemplo, o exemplo de quantificação relativa, no <i>Guia do usuário</i> para o software MultiQuant.



Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
Per Sample Quant-Qual	Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, informações sobre a amostra e a tabela de resultados apenas para os analitos selecionados. A Results Table do analito é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela.	N/A
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, informações sobre a amostra e a tabela de resultados apenas para os analitos selecionados. A Results Table do analito é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela.	O estado oculto de uma linha tem preferência sobre o estado da caixa de seleção <b>Reportable</b> . Se a caixa de seleção <b>Reportable</b> for selecionada, mas a linha estiver oculta, a linha não será reportada.

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
Per sample Quant-Qual with statistics	Um relatório que mostra componentes para cada amostra com uma tabela WYSIWYG. XIC, MS e MS/MS são exibidos. Uma tabela de resumo de estatísticas para a área é exibida ao final do relatório.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se a tabela de componentes possuir componentes UV, o traço UV será reportado sob o gráfico XIC no relatório.</li> </ul> <hr/> <p><b>Nota:</b> Se o nome do componente UV estiver no formato [<i>compound_nameuv</i>] ou [<i>uv</i>], os traços UV serão comunicados, porque o sufixo <i>uv</i> está associado ao relatório UV MS Qual.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Se uma amostra for rotulada como um QC e houver 2 ou mais amostras, então a média, STDEV e %CV serão calculadas e incluídas em uma tabela de resumo QC ao final do relatório.</li> <li>• Se a caixa de seleção <b>Reportable</b> estiver desmarcada para uma linha QC, essa linha não será usada para qualquer cálculo na tabela de resumo QC.</li> </ul>
Per Analyte Quant-Qual	Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, tabela de resultados, curvas de calibração e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Este modelo é ideal para uma tabela de resultados com um grupo definido nela.	N/A

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
Positive Hits Qual	Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui File Information; Sample Information; Results Table do analito apenas para os analitos selecionados, cromatogramas de todos os analitos, padrão interno e o XIC, os espectros de MS adquiridos/teóricos e os espectros de MS/MS adquiridos/da biblioteca para cada analito selecionado. A Results Table do analito é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela.	N/A
Qual CSV report	Relatório em formato csv que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui informações de arquivos, informações de amostras e a tabelas de resultados de analitos.	Recomenda-se usar a opção CSV para formato de Relatório.
Sample Summary	Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção da tabela de resumo dos analitos. Este modelo de relatório é ideal para uma tabela de resultados com grupos.	N/A

Tabela 6-11: Modelos padrão (continuação)

Modelo	Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report)	Observações adicionais
UV MS Qual report	Um relatório que mostra, para cada amostra, os componentes dessa amostra e seu componentes UV correspondente com uma tabela WYSIWYG. XIC, MS e MS/MS são exibidos juntamente com os dados UV. Uma tabela de resumo de estatísticas para a área é exibida ao final do relatório.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Os dados UVMS devem ser processados com a convenção de nomenclatura <i>compound 1</i> (qualquer cadeia) para o componente do espectrômetro de massas (MS) e <i>compound 1uv</i> (qualquer cadeia mais uv) para o componente UV correspondente.</li> <li>• Somente as luzes de tráfego do Erro de massa, do Erro de massa do fragmento, da Confiança RT, da Confiança do isótopo e da Confiança da biblioteca são exibidas.</li> <li>• Uma tabela de gráficos é criada para mostrar os componentes individuais da Results Table, incluindo XIC, Traço MS1, Traço MS/MS e as informações do cabeçalho do composto 1 e o traço UV do composto 1uv. Consulte <a href="#">Figura 6-35</a>.</li> <li>• Os gráficos do analito são repetidos somente para os experimentos MS, não para os experimentos UV.</li> <li>• Se uma amostra for rotulada como um QC e houver 2 ou mais amostras, então a média, STDEV e %CV serão calculadas e incluídas em uma tabela de resumo QC ao final do relatório. Consulte <a href="#">Figura 6-36</a>.</li> <li>• Se a caixa de seleção <b>Reportable</b> estiver desmarcada para uma linha QC, essa linha não será usada para qualquer cálculo na tabela de resumo QC.</li> </ul>

Figura 6-35: Tabela de gráficos

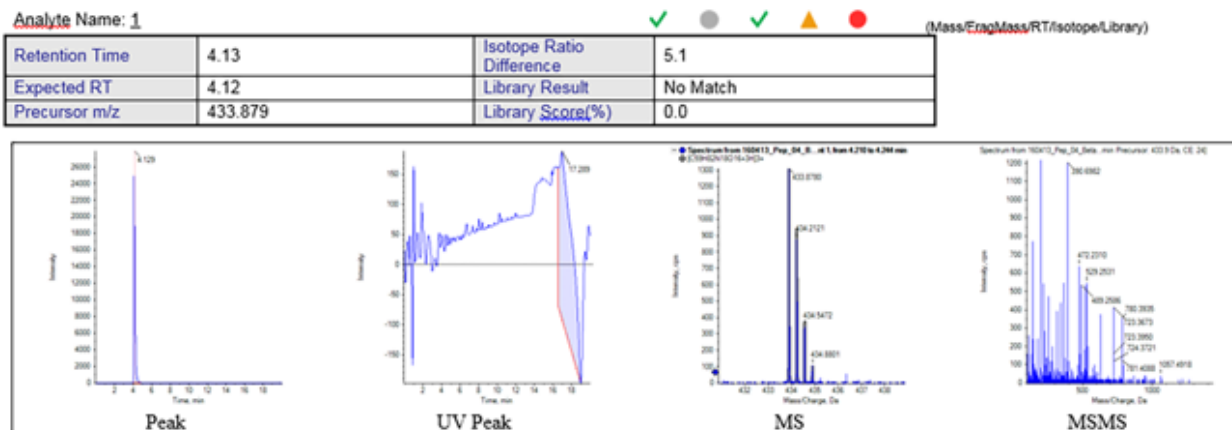


Figura 6-36: Tabela de estatísticas

Statistics (Grouped by Concentration for QCs - Area)

Analyte Peak Name (MRM Transition)	Mean	Std. Deviation	% CV	Number of Values Used
1 (723.3573 - 723.3773)	1.062e4	7.367e2	6.93	2 of 2
2 (753.3091 - 753.3291)	2.215e4	6.858e2	3.10	2 of 2
3 (760.3353 - 760.3553)	9.332e3	1.955e1	0.21	2 of 2
4 (631.3450 - 631.3650)	3.244e4	1.110e3	3.42	2 of 2
5 (636.3373 - 636.3573)	1.144e5	3.962e2	0.35	2 of 2
6 (871.4354 - 871.4554)	6.479e4	1.198e3	1.85	2 of 2
7 (932.4493 - 932.4693)	2.183e4	7.301e2	3.34	2 of 2
8 (1000.5743 - 1000.5943)	2.553e4	5.007e2	1.96	2 of 2
9 (755.4352 - 755.4552)	1.127e5	8.422e3	7.48	2 of 2
10 (1184.5929 - 1184.6129)	3.576e4	7.231e2	2.02	2 of 2
11 (884.4871 - 884.5071)	5.183e4	1.512e3	2.92	2 of 2
12 (1176.5468 - 1176.5668)	1.670e4	1.848e2	1.11	2 of 2
13 (871.9418 - 871.9618)	1.597e5	5.501e2	0.34	2 of 2
14 (879.4236 - 879.4436)	1.868e5	5.182e3	2.77	2 of 2

Quando ocorre um problema, o software Central Administrator Console (CAC) registra os relatórios e avisos de erros que são exibidos na tela. O espaço de trabalho Event Log contém registros de eventos do sistema que incluem erros, avisos e mensagens.

Para abrir este espaço de trabalho, clique no ícone Event Log na página Home.

**Tabela 7-1: Colunas do espaço de trabalho Event Log**

Rótulo	Descrição
<b>Current</b>	(Atual)Uma lista de eventos atuais para cada subsistema.
<b>Severity</b>	(Gravidade)Indica o tempo do evento: informação, erro ou advertência.
<b>Time</b>	(Hora)A hora em que o evento ocorreu.
<b>Subsystem</b>	(Subsistema)O subsistema em que o evento ocorreu.
<b>Event</b>	(Evento)Uma descrição do evento. Essa informação pode ser usada para solucionar problemas do sistema.
<b>User</b>	(Usuário)O nome do usuário e o sistema onde o evento ocorreu.  <b>Nota:</b> Para eventos acionados por uma regra de decisão, este é o usuário que enviou o lote.

## Logs de eventos

Os seguintes registros estão disponíveis:

- **All** (Todos)
- **Device** (Dispositivo)
  - **LC** (LC)
  - **Mass Spectrometer** (Manutenção do espectrômetro)
- **Workspace** (Espaço de trabalho)
  - **Batch** (Lote)
  - **Explorer** (Explorador)
  - **Devices** (Dispositivos)
  - **General** (Geral)
  - **LC Method** (Método de LC)
  - **MS Method** (Método de MS)

- **MS Tune** (Ajuste MS)
- **Analytics** (Análise)
- **Queue** (Fila)
- **Users** (Usuários)
- **Configuration** (Configuração)

Após um log de eventos conter 20.000 registros, SCIEX OS arquiva automaticamente os registros e começa um novo log de eventos. Para obter mais informações, consulte a seção: [Arquivos do Event Log](#).

## Visualizar os registros

1. Abra o espaço de trabalho Event Log.
2. Clique em um item da lista no painel à esquerda para visualizar os registros.

## Registros de arquivos

1. Abra o espaço de trabalho Event Log.
2. Clique em **Archive > Archive Log**.

Figura 7-1: Menu Archive: registro de arquivos

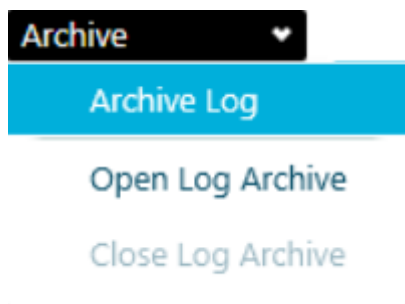
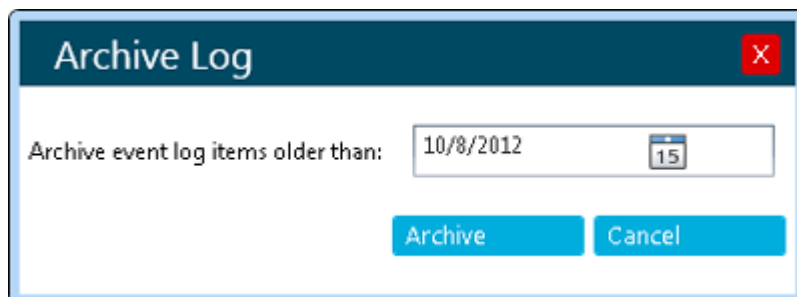


Figura 7-2: Caixa de diálogo Archive

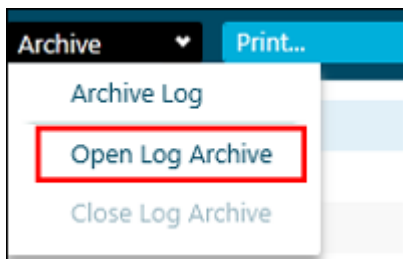


3. No campo **Archive event log items older than**, clique na data do ícone e, em seguida, selecione uma data.
4. Clique em **Archive**.

### Visualizar registros arquivados

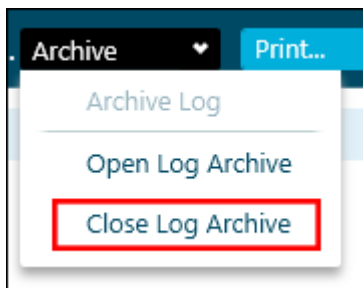
1. Abra o espaço de trabalho Event Log.
2. Clique em **Archive > Open Log Archive**.

**Figura 7-3: Menu Archive: Open Log Archive**



3. Abra o arquivo solicitado.
4. Clique em **Archive > Close Log Archive**.

**Figura 7-4: Menu Archive: Close Log Archive**



### Imprimir registros

1. Abra o espaço de trabalho Event Log.
2. (Opcional) Abra um registro arquivado. Consulte a seção: [Visualizar registros arquivados](#).
3. Clique em **Print**.  
A caixa de diálogo Print abrirá.
4. Selecione uma impressora e, em seguida, clique em **Print**.

### Arquivos do Event Log

Os registros de eventos se acumulam nos logs de eventos e podem criar arquivos grandes que são difíceis de navegar e gerenciar.

Quando um log de eventos atinge 20.000 registros, ele é arquivado. Um registro final para evento é adicionado ao log de eventos e, em seguida, o log de eventos é salvo com um nome de arquivo que indica o tipo de log de eventos, a data e a hora. Um novo log de



eventos é criado. O primeiro registro no novo log de eventos afirma que o log de eventos foi arquivado.

Os arquivos de log de eventos são armazenados na pasta  
C:\ProgramData\SCIEX\Clearcore2.Acquisition. Os nomes dos arquivos estão no formato dados do <logfile>Archive\_<YYYYMMDD>\_<HHMMSS>. Por exemplo, CustomerLogArchive\_20220427\_172915.data.

Esta seção explica como usar a funcionalidade de auditoria.

## Visualizar registros de rastreamento de auditoria

1. Abra o espaço de trabalho Audit Trail.
2. Para visualizar o rastreamento de auditoria para a estação de trabalho, clique em **Workstation** no painel esquerdo.
3. Para visualizar o rastreamento de auditoria de um projeto, selecione o projeto no painel esquerdo. Em seguida, selecione um dos seguintes procedimentos:
  - **Eventos gerais:** para mostrar os registros da auditoria que se aplicam a todo o projeto, como alterações de mapa e aquisição de amostra.
  - **Análise:** para mostrar os registros da auditoria de uma Results Table.
  - **Todos os eventos do projeto:** para mostrar os registros de auditoria para os eventos gerais e eventos de processamento.

## Filtrar eventos auditados usando uma pesquisa por palavra-chave


O usuário pode filtrar eventos auditados no rastreamento de auditoria usando uma pesquisa por palavra-chave. A pesquisa destaca cada ocorrência do texto.

1. Abra o espaço de trabalho Audit Trail.
2. Selecione o rastreamento de auditoria a ser pesquisado. Consulte a seção: [Visualizar registros de rastreamento de auditoria](#). Os registros de Audit Trail são mostrados.
3. Digite a palavra no campo **Find in Page**. Todas as ocorrências da palavra naquela página serão realçadas.
4. Use os botões Next (▼) e Previous (▲) para passar pelas correspondências.

## Filtrar eventos auditados usando um conjunto de critérios especificados

O usuário pode filtrar eventos auditados no rastreamento de auditoria usando um conjunto de critérios especificados.

1. Abra o espaço de trabalho Audit Trail.

2. Selecione o rastreamento de auditoria a ser filtrado. Consulte a seção: [Visualizar registros de rastreamento de auditoria](#). Os registros de Audit Trail são mostrados.
3. Clique em **Filter** (  ). A caixa de diálogo Filter Audit Trail é aberta.
4. Utilize as listas para definir o critério de filtro requerido.


**Figura 8-1: Filter Audit Trail Dialog**

Item	Descrição
1	Na lista <No Filter>, selecione o campo a ser filtrado. Os seguintes campos estão disponíveis para filtragem: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Description</b></li> <li>• <b>Sample Name</b></li> <li>• <b>Full User Name</b></li> <li>• <b>E-Signature</b></li> <li>• <b>Reason</b></li> </ul>
2	Selecione para filtrar uma palavra ou frase exata.
3	Selecione para filtrar uma palavra ou frase parcial.

## Auditoria

---

Item	Descrição
4	Especifique o texto a ser filtrado, conforme a seguir: <ul style="list-style-type: none"><li>• Digite todo o texto da string. Selecione <b>Is</b> (item 2)</li><li>• Digite parcialmente o texto da string. Selecione <b>Contains</b> (item 3)</li><li>• Selecione <b>Yes</b> ou <b>No</b>.</li></ul>
5	Use para filtrar eventos que ocorreram durante uma data e hora específicas.

5. Para limpar o filtro, siga estas etapas:
  - a. Clique em **Filter** ().
  - b. Clique em **Clear** para redefinir todos os critérios de filtro para **No Filter**.
  - c. Clique em **OK**.

## Imprimir rastreamento de auditoria

1. Abra o espaço de trabalho Audit Trail.
2. Selecione o rastreamento de auditoria a ser impresso. Consulte a seção: [Visualizar registros de rastreamento de auditoria](#).
3. Clique em **Print**.  
A caixa de diálogo Print abrirá.
4. Selecione uma impressora e, em seguida, clique em **Print**.

Esta seção descreve conceitos usados no software.

## Gerenciamento de dados

O SCIEX OS requer um computador com o sistema operacional Windows 7, de 64 bits, ou Windows 10, de 64 bits. O computador e o software do sistema associado funcionam com o controlador do sistema e o firmware associado para controle do sistema e aquisição de dados. Durante a operação do sistema, os dados adquiridos são enviados para o software SCIEX OS, no qual eles podem ser exibidos como espectros de massa completos, intensidade de um íon ou vários íons em relação ao tempo, ou corrente iônica total em relação ao tempo.

## Técnicas de varredura

O sistema é versátil e confiável para a realização de análises de espectrometria de massas por cromatografia líquida em amostras líquidas para identificar, quantificar e examinar compostos.

O sistema usa as seguintes técnicas de espectrometria de massas para analisar amostras:

- Dois modos de aquisição simples (MS):
  - Análise por quadrupolo (apenas para calibração do Q1)
  - Análise por tempo de voo (TOF)
- Um modo de análise sequencial (MS/MS):
  - Espectrometria de massas de íon produto

## Visualização de dados diferente

### Cromatogramas

Um cromatograma mostra a variação de uma medida de quantidade com relação ao tempo em um experimento repetitivo. Por exemplo, quando o instrumento é programado para repetir determinado conjunto de varreduras espectrais de massas diversas vezes. Os dados cromatográficos são contínuos, mesmo que a intensidade dos dados seja zero. Os cromatogramas não são gerados diretamente pelo instrumento, mas sim a partir dos espectros de massas.

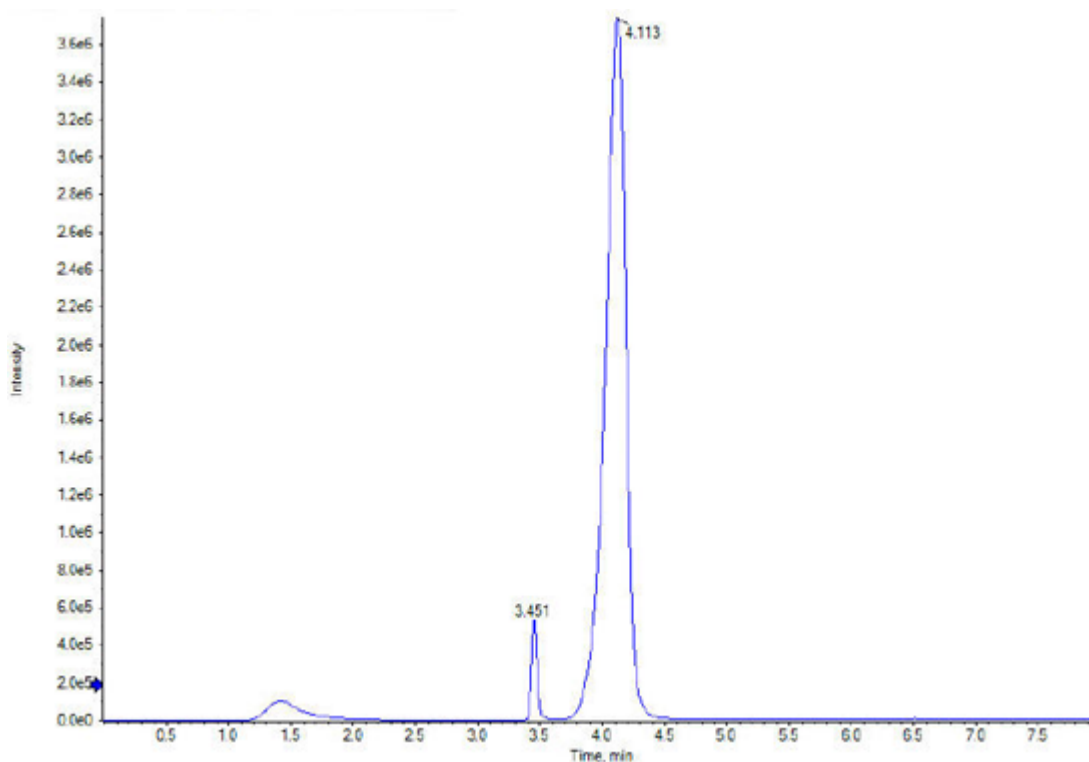
No gráfico do cromatograma, a intensidade, em contagens por segundo (cps), aparece no eixo Y em função do tempo no eixo X. Os picos são rotulados automaticamente.

Os picos cromatográficos podem mudar em tempo de retenção e intensidade com base em alterações nas condições cromatográficas para uma amostra específica.

O software mostra os seguintes tipos de cromatogramas:

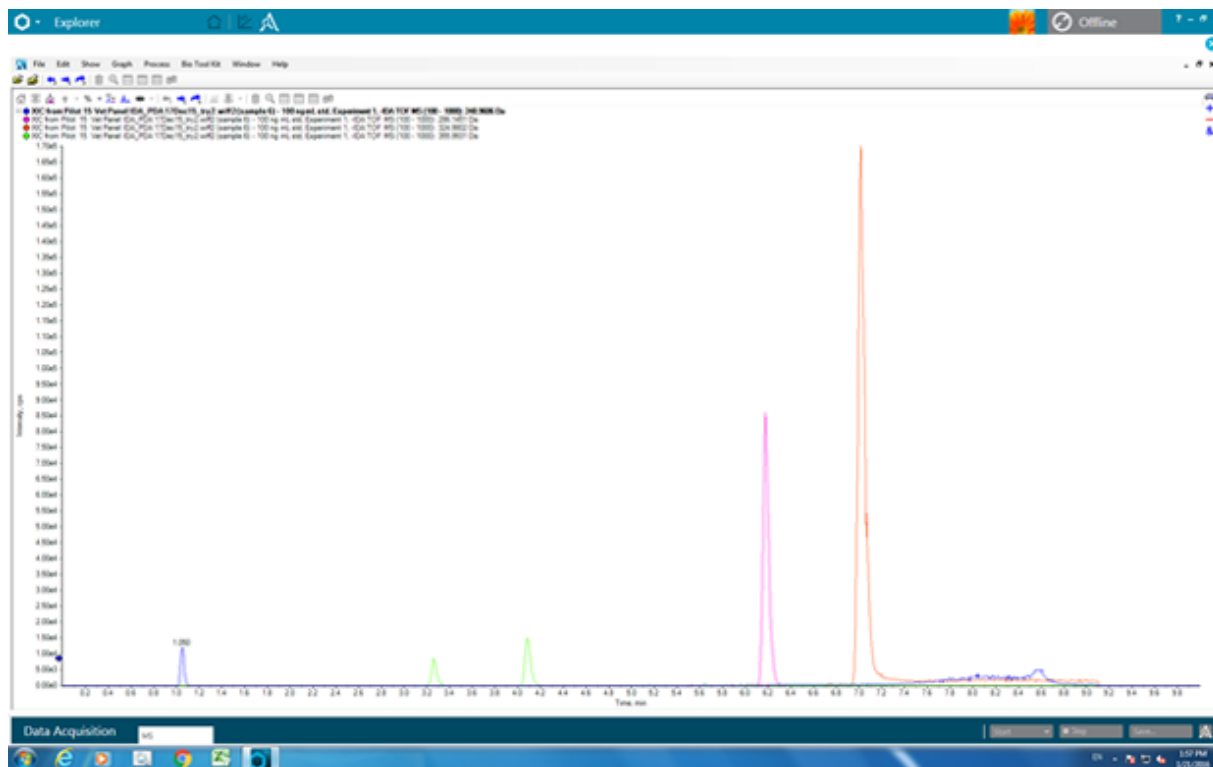
- **TIC:** o gráfico da corrente iônica total como uma função do tempo.

**Figura A-1: Exemplo de TIC**



- **XIC:** um cromatograma de íons criado por valores de intensidade de um único valor de massa ou uma faixa de massas de uma série de varreduras do espectro de massas. Um XIC indica o comportamento de determinada massa ou faixa de massa como função do tempo.

Figura A-2: Exemplo de XIC



## Espectros

Um espectro são os dados obtidos diretamente a partir do espectrômetro de massas e normalmente representa o número de íons detectados com os valores específicos da relação massa-carga ( $m/z$ ). Ele aparece como um gráfico com valores  $m/z$  no eixo X e a intensidade (cps) representada no eixo Y.

Quando os dados são visualizados como um espectro, as informações específicas à massa de um composto são obtidas. Um espectro fornece os valores de  $m/z$  para os íons correspondentes para um pico cromatográfico particular. Esses íons podem ser usados para encontrar informações mais específicas. Por exemplo, um espectro mostra todas as massas que compõem um pico, incluindo a intensidade de cada uma.

Intensidades de espectro podem mudar, mas o valor de  $m/z$  é fixo porque a massa de um composto não muda.

Há duas maneiras de gerar dados espectrais:

- Se apenas uma varredura for adquirida, os dados aparecerão como espectro.
- A partir de um cromatograma.

## Espectros de reconstrução

Um espectro processado é gerado ao aplicar o algoritmo de deconvolução a um espectro MS ou MS/MS. O espectro de reconstrução consiste de massas sem carga ou neutras com intensidade correspondente. O espectro normalmente fornece informações de peso

molecular para um composto. A intensidade espectral pode mudar, mas as informações de peso molecular não se alteram.

Um espectro de reconstrução típica é mostrado com massa (Da) no eixo X e intensidade no eixo Y.

## Regras de decisão

Enquanto um lote está sendo processado no espaço de trabalho Queue, o software pode selecionar ações corretivas em resposta a resultados de análise específicos. Por exemplo, se uma amostra não atender aos critérios de aceitação definidos no método de processamento (resultado da análise), o software pode ser instruído a reinjetar a amostra (ação corretiva).

Essa funcionalidade é implementada com regras de decisão. Uma regra de decisão consiste de duas partes principais:

- Uma regra de alerta, que define o resultado da análise  
Regras de alerta são definidas nos métodos de processamento.
- Uma ação corretiva, que é aplicada se o resultado do processamento não satisfizer os critérios para o resultado da análise.

Entre as ações corretivas, incluem-se o seguinte:

- Parar a fila
- Abortar o lote
- Injetar uma amostra diferente
- Reinjetar a amostra sinalizada

Ao criar um lote, o usuário pode ativar as regras de decisão para o lote e, em seguida, selecionar as regras de decisão a serem usadas.

## Algoritmo Dynamic Background Subtraction

O algoritmo Dynamic Background Subtraction melhora a detecção de íons precursores em um experimento de Aquisição dependente de informações (IDA). Quando o algoritmo é ativado, a IDA usa um espectro que tenha sido submetido à subtração de fundo para selecionar o íon precursor de interesse para análise MS/MS, em vez de selecionar o precursor a partir do espectro de pesquisa diretamente. Como esse processo ocorre durante a análise de LC, o algoritmo habilita a detecção de espécies à medida que seu sinal aumenta em intensidade. Como resultado, esse algoritmo foca na detecção e análise dos íons precursores na porção de subida do pico LC, até o topo dos picos de LC ou ligeiramente acima deles.

## Análise quantitativa

A análise quantitativa é usada para encontrar a concentração de uma determinada substância em uma amostra. Ao analisar uma amostra desconhecida e compará-la com amostras padrão, ou seja, amostras que contêm a mesma substância com concentrações



conhecidas, o software pode calcular a concentração da amostra desconhecida. O processo envolve a criação da curva de calibração usando a resposta de sinal ou proporção de resposta dos padrões e, em seguida, calculando as concentrações das amostras desconhecidas. As concentrações calculadas de todas as amostras são adicionadas a uma Results Table.

A análise quantitativa é mais comumente realizada usando uma varredura Multiple Reactions Monitoring (MRM). Em uma varredura MRM, um íon precursor e um íon produto característico são usados para definir uma transição MRM altamente específica do analito. A transição MRM combinada com o tempo de retenção associado ao analito durante a cromatografia líquida oferece a especificidade requerida para a quantificação.

A quantificação é alcançada por meio do uso de métodos de aquisição MRM LC-MS/MS validados, curvas padrão de aquisição ou calibração e a integração subsequente dos picos associados aos compostos de interesse. A relação da curva de calibração entre a resposta do sinal e a concentração é utilizada para determinar a quantidade de um analito particular em uma amostra desconhecida.

### Adição padrão

Adição padrão pode ser usada para determinar a concentração de um composto em uma amostra em que o efeito de uma matriz conhecida evita o uso de uma curva de calibração tradicional.

Este recurso permite que o usuário execute cálculos de adição padrão diretamente no software. Se o recurso de adição padrão estiver ativado no fluxo de trabalho de quantificação, o cálculo de adição padrão será executado durante a integração e os resultados serão exibidos na Results Table.

Se esse recurso estiver ativado, esses parâmetros de regressão estarão desativados:

- Regression Type
- Weighting Type
- Automatic Outlier Removal

### Ativar o recurso de adição padrão

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Clique em **Process Method > New**.

---

**Dica!** Para editar um método de processamento existente, clique em **Process Method > Edit embedded method** e então siga as seguintes etapas.

---

3. Selecione a página Workflow e em seguida selecione pelo menos um fluxo de trabalho e as amostras de referência.
4. Selecione a página Components e em seguida defina os nomes, as massas, os padrões internos, os grupos dos componentes etc.

**Dica!** Se o grupo estiver definido na tabela Components, o usuário poderá optar por somar os íons no grupo, mesmo que o íon precursor e o índice experimental sejam diferentes nas transações. Os íons somados não aparecem na tabela, mas aparecem na página Integration e na tabela de resultados como <group name>\_Sum. Este recurso é útil para quantificar proteínas e peptídeos.

---

**Dica!** Quando o tempo de retenção dos componentes não for conhecido, configure o **Retention Time Mode** para uma fórmula de massa ou química para **Find  $n$  peaks**, em que  $n$  seja 1, 2, 5, 10 ou todos. O software identifica o número especificado de recursos com a maior área de pico, atribui o tempo de retenção apropriado e, em seguida, executa um fluxo de trabalho de processamento de pico direcionado. Quando o processamento está concluído, o método integrado para a Results Table pode ser salvo como um método direcionado normal.

---

5. Seccione a página Integration e em seguida selecione os parâmetros de integração para cada componente.
6. Clique em **Options > Quantitate by standard addition**.

Este recurso possui requisitos específicos para os seguintes campos do lote:

- **Sample ID:** Todas as amostras pertencentes ao mesmo grupo de adição padrão devem ter a mesma ID de amostra.
- **Sample Type:** Todas as amostras a serem quantificadas que usam a adição padrão devem ter o tipo de amostra **Standard**.
- **Actual Concentration:** Este campo deve conter a concentração conhecida do padrão adicionada a cada amostra do grupo de adição padrão. Por exemplo, para amostras sem padrão adicionado, o valor é **0**. Dados desta coluna são marcados como eixo X na curva de calibração.

Se este recurso estiver ativado, a tabela de resultados conterá um novo campo **Standard Addition Accuracy** que compara o valor **Standard Addition Calculated Concentration** da amostra com o valor **Standard Addition Actual Concentration**.

Uma visualização dinâmica da curva de calibração de uma amostra específica é mostrada na curva de calibração.

## Reconstrução de massa

Para moléculas grandes, um estado de carga expandido é normalmente observado em um espectro de varredura completa. O recurso de reconstrução de massa permite que o usuário realize uma deconvolução do espectro diretamente no software e, em seguida, realize uma quantificação com base nos picos de massa deconvoluído ou sem carga. Se o recurso de reconstrução de massa estiver ativado no fluxo de trabalho de quantificação, a localização do pico, deconvolução do espectro, localização do pico de massa e integração são realizadas durante o processamento, e os resultados são mostrados na Results Table.

## Habilitar recurso Mass Reconstruction

**Nota:** Mass Reconstruction é compatível somente com o fluxo de trabalho Quantitation.

---

**Nota:** Mass Reconstruction é compatível somente com os algoritmos de integração MQ4 e Summation.

---

**Nota:** Se Mass Reconstruction estiver ativado, **Options > Sum Multiple Ion** será desativado.

---

1. Abra o espaço de trabalho Analytics.
2. Clique em **Process Method > New**.

**Dica!** Para editar um método de processamento existente, clique em **Process Method > Edit embedded method** e então siga as seguintes etapas.

---

3. Selecione a página Workflow e em seguida selecione o fluxo de trabalho **Quantitation** e as amostras de referência.
4. Selecione a página Components.
5. Clique em **Options > Mass Reconstruction**.
6. Adicione os componentes digitando as informações nos campos solicitados.

**Nota:** O campo **Expected MW** é opcional.

---

7. Clique em **Integration** para visualizar a página de integração e analise a cromatografia XIC, espectro médio e espectro de reconstrução e para selecionar a massa de destino.
8. Salve o método.

Se esse recurso for ativado, a Results Table conterá as seguintes colunas novas: **Expected MW, MW, MW Delta (Da), MW Delta (ppm), IS Expected MW, IS MW, IS MW Delta (Da)** e **IS MW Delta (ppm)**.

## Análise qualitativa

Análise qualitativa é a identificação de um composto específico ou desconhecido. Na espectrometria de massas, a determinação de qual composto está presente é realizada com a exatidão da massa, o tempo de retenção, o padrão isotópico, a pesquisa na biblioteca e a localização de fórmulas. Com todas essas ferramentas é possível elevar a confiança na identificação de compostos conhecidos e desconhecidos nas amostras.

## Precisão de massa

Ao tentar identificar um composto específico conhecido em uma amostra, é importante observar a exatidão de massa do composto e determinar se um possível acerto desse composto tem uma exatidão de massa dentro de determinada tolerância. Por exemplo, imazalil possui uma fórmula química  $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$ , que resulta em uma massa monoisotópica de 296,0483, até quatro casas decimais. Um aduto protonado é um íon com uma carga positiva que é normalmente detectada usando um espectrômetro de massas. O aduto protonado de imazalil possui uma proporção massa/carga ( $m/z$ ) de 297,0556. Se houver suspeita de que imazalil está em uma amostra, compare a  $m/z$  do composto encontrado com a  $m/z$  do imazalil protonado e determine quão próxima é sua

correspondência. Quanto menor for a diferença, em ppm ou Da, mais provavelmente o composto encontrado será uma correspondência.

## Tempo de retenção

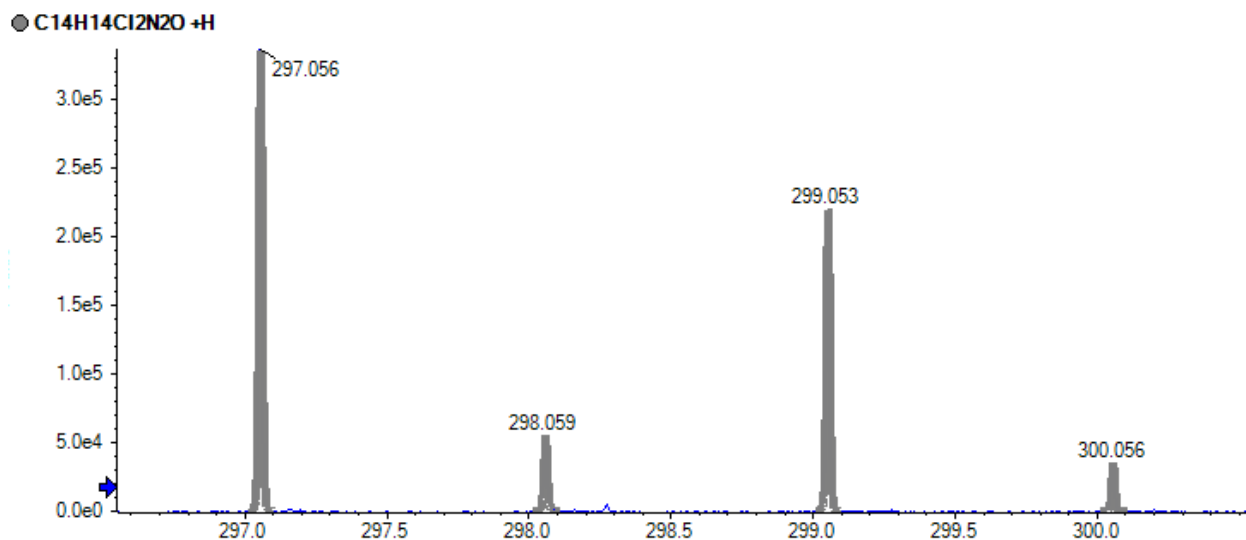
A maioria dos espectrômetros de massas usam algum tipo de cromatografia. O tempo de retenção para um composto é determinado pela injeção de um padrão conhecido do composto. O tempo de retenção pode ser usado para ajudar a identificar os compostos de destino em uma amostra. Se o composto suspeito estiver em uma amostra desconhecida, quanto mais próximo o tempo de retenção estiver do tempo de retenção do padrão, maior a probabilidade de o composto desconhecido ser identificado. Os tempos de retenção podem alterar-se e devem ser rotineiramente confirmados usando um padrão conhecido.

## Padrão isotópico

O espectro de massas de varredura total de um composto em um espectrômetro de massas apresenta um padrão isotópico distinto com base em sua fórmula molecular.

Para o padrão de isótopo para imazalil, consulte a figura a seguir.

**Figura A-3: Padrão isotópico (Imazilil)**



O padrão isotópico do imazalil compreende diferentes isótopos de massa para os elementos. O padrão isotópico é calculado teoricamente, depois comparado com o que foi realmente adquirido para o composto no desconhecido. Quanto mais aproximada a correspondência entre o padrão isotópico teórico e real, maior a probabilidade de o composto ser identificado.

## Pesquisa na biblioteca

Comparar o espectro de MS/MS adquirido de amostras desconhecidas com um banco de dados de compostos com espectros de referência é uma das ferramentas mais poderosas na análise qualitativa. Os algoritmos da pesquisa na biblioteca comparam os espectros desconhecidos da amostra e tentam associá-los aos compostos conhecidos e aos espectros

no banco de dados. Quanto mais aproximada a correspondência e mais alta a pontuação, maior a probabilidade de o composto ser identificado.

A pureza, a adequação e a adequação reversa são calculadas da seguinte maneira:

- Se houver uma determinada massa, tanto no espectro da biblioteca (reduzido) como no espectro desconhecido (reduzido) cuja relação de intensidade esteja dentro dos limites especificados pelo usuário, a intensidade do pico no espectro da biblioteca será igual à do espectro desconhecido

- A pureza é calculada da seguinte forma:

$100,0 (UL_{total})^2 / (U_{total} \cdot L_{total})$  em que:

$$U_{total} = \sum U_m \cdot U_m$$

$$L_{total} = \sum L_m \cdot L_m$$

$$UL_{total} = \sum U_m \cdot L_m$$

As somas incluem todas as massas em que as intensidades  $U_m$  e  $L_m$  são as raízes quadradas da massa ponderada, que é reduzida; desconhecido; e entradas da biblioteca. A pureza deve se enquadrar no intervalo de 0 a 100 e é uma medida da similaridade do espectro da biblioteca e o espectro desconhecido.

- A adequação é calculada exatamente como a pureza, exceto pelo fato de que apenas massas que ocorrem no espectro da biblioteca são incluídas nas somas. Isso não tem qualquer efeito em  $L_{total}$  ou  $UL_{total}$  porque nenhum termo é excluído dessas somas. A adequação é uma medida do nível em que o espectro da biblioteca está contido no espectro desconhecido. Uma adequação alta e uma pureza baixa indicam que o espectro desconhecido é provavelmente impuro, mas contém o composto da biblioteca.
- A adequação reversa também é calculada como a pureza, exceto pelo fato de que apenas massas que ocorrem no espectro desconhecido são incluídas nas somas. A adequação reversa é uma medida do nível em que o espectro desconhecido está contido no espectro da biblioteca.

## Localização de fórmulas

Com um número de massa, o algoritmo de localização de fórmulas tenta estimar a fórmula química para o composto, com base nos espectros de MS e MS/MS gerados por um espectrômetro de massas de massa. Uma pontuação de localização de fórmulas não significa necessariamente que o composto na amostra é aquele identificado pelo algoritmo de localização de fórmulas, porque várias fórmulas frequentemente correspondem a erros de massa. É necessário ter cuidado e realizar outros testes antes que um composto seja identificado com o uso da localização de fórmulas.

---

**Nota:** Não se recomenda realizar a busca de fórmula com sistemas de massa nominais.

---

O algoritmo de localização de fórmulas usa as configurações de luzes de semáforo para precisão de massa. Um erro de ppm vermelho obtém uma pontuação de 0 e uma correspondência perfeita obtém uma pontuação de 100.

O espectro de MS contribui com 67% da pontuação de localização de fórmulas e o espectro de MS/MS contribui com 33%. Como resultado, a capacidade de a fórmula estimar a massa de MS é a influência principal na pontuação. No entanto, a correspondência de fragmentos de MS/MS também influencia a pontuação.

O padrão de isótopo é usado para gerar a lista de fórmulas encontradas, mas não é usada para gerar a pontuação final. Portanto, a fórmula com o padrão de isótopo provavelmente não será incluída na lista.

Uma lista de fórmulas possíveis é determinada com o uso da exatidão de massa precursora, padrão isotópico e fragmentação por MS/MS. As fórmulas propostas são pontuadas com base na exatidão de massa precursora e uma exatidão de massa média do MS/MS dos fragmentos correspondentes.

## Integração

Em análises quantitativas ou qualitativas, a integração refere-se à geração de áreas de picos cromatográficos ou alturas para os compostos de interesse. Um método de processamento contém todas as informações necessárias para processar os dados.

A compilação de informações quantitativas ou qualitativas para determinado grupo de amostras é chamado de tabela de resultados. Consulte [Results Tables](#).

O software possui três algoritmos de integração que podem ser usados:

- **MQ4:** seleciona uma baixa concentração, mas não a mais baixa concentração, padrão ou amostra do controle de qualidade por referência à amostra representativa da corrida analítica.
- **AutoPeak:** seleciona uma alta concentração, sem ser saturada, padrão ou amostra de controle de qualidade por referência à amostra representativa da corrida analítica.
- **Somatório:** não realiza uma pesquisa de pico normal, mas assume que um pico está presente próximo ao tempo de retenção esperado.

Também é possível integrar manualmente picos que não foram detectados pelos algoritmos.

## Parâmetros de algoritmos de integração AutoPeak

Os seguintes parâmetros são usados para identificar e reportar o pico de interesse.

Para obter uma lista completa de parâmetros disponíveis, consulte o Sistema de ajuda.

- **Local peak baseline:** o software avalia alterações na linha de base localmente em torno do pico, ao contrário de calcular a linha de base com relação a todo o cromatograma.
- **Linear peak baseline:** o software insere uma linha entre os pontos no início e no final de um grupo específico de picos, ao contrário da possibilidade de ter uma referência não linear abaixo do pico.

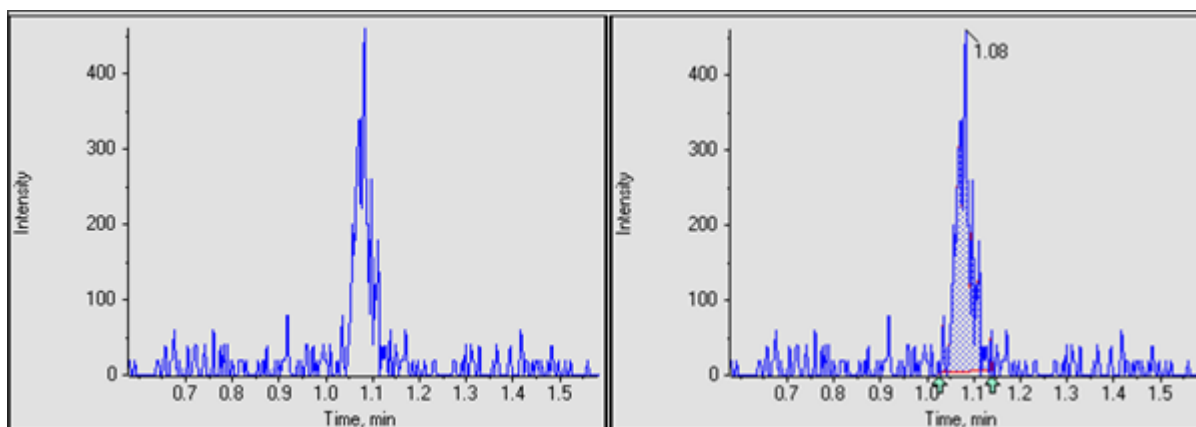
**Saturation correction:** quando o algoritmo detecta que um pico está saturado, ele usa o modelo para estimar como o pico deveria ficar caso o detector não estivesse saturado. Isso faz com que o perfil se estenda sobre o topo do pico para aproximar a resposta que seria obtida. Isso pode estender o intervalo dinâmico linear das curvas de calibração. Essa

opção só fica disponível ao definir os valores padrão gerais de algoritmo, e não durante a criação do método de processamento ou revisão do pico individual, pois não é útil usar essa configuração para apenas alguns picos.

## Minimum Signal/Noise

Se o sinal mínimo de ruído for definido para sete, conforme mostrado no gráfico à esquerda da figura a seguir, o pico não será reportado. Se o sinal mínimo de ruído for definido para dois, conforme mostrado no gráfico à direita, o pico será reportado. Esse parâmetro não afeta a integração.

Figura A-4: Limite S/N



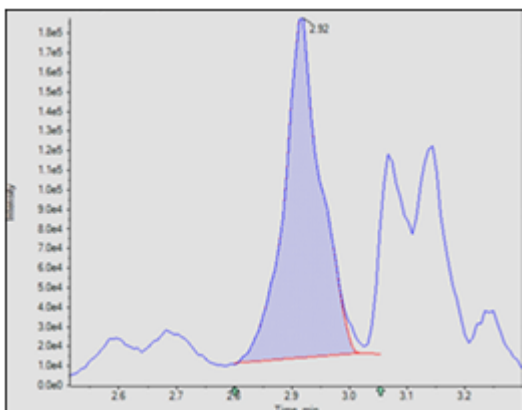
## Limite de confiança

Esse parâmetro é usado para filtrar picos potenciais que são falsos positivos. O valor padrão é 50%, que é geralmente adequado. No entanto, o usuário pode querer usar um valor maior para os dados ruidosos ou para dados para os quais a largura do pico possui uma variação considerável de amostra para amostra.

As duas figuras a seguir mostram como o **Confidence Threshold** afeta o número de picos identificados. Se o **Confidence Threshold** é configurado como 50%, o pico com um pequeno sub-pico é identificado como um único pico. Se o **Confidence Threshold** for diminuído para 16%, o algoritmo SignalFinder encontra dois picos. Arraste entre duas regiões de picos para visualizar os dois picos.

Para determinar quais outros picos estão potencialmente presentes neste único pico, e se o **Confidence Threshold** correto não é conhecido, pressione **Ctrl** e arraste entre a região de interesse do pico. Isso abaixa automaticamente o **Confidence Threshold** para revelar o segundo pico de interesse que não está presente quando o **Confidence Threshold** é configurado para 50%.

Figura A-5: Confiança de 50%



Na confiança de 16%, dois picos são encontrados. Arraste entre a área de pico para identificar os dois picos.

Figura A-6: Confiança de 16%

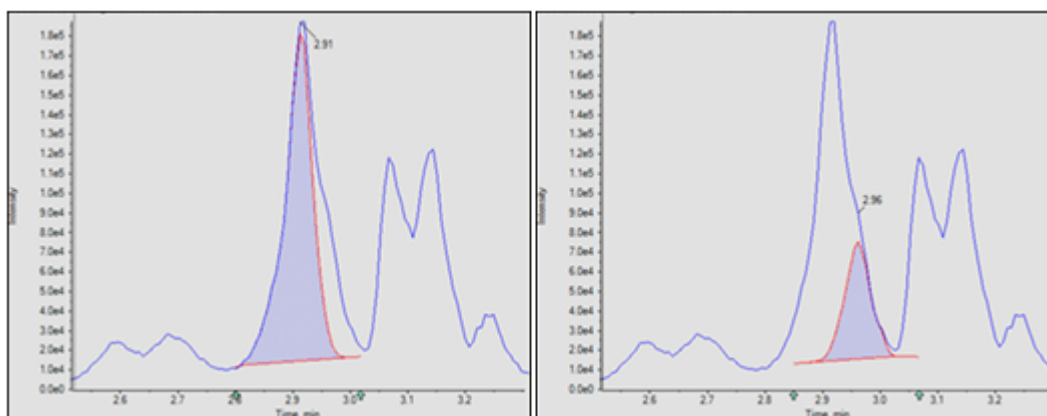
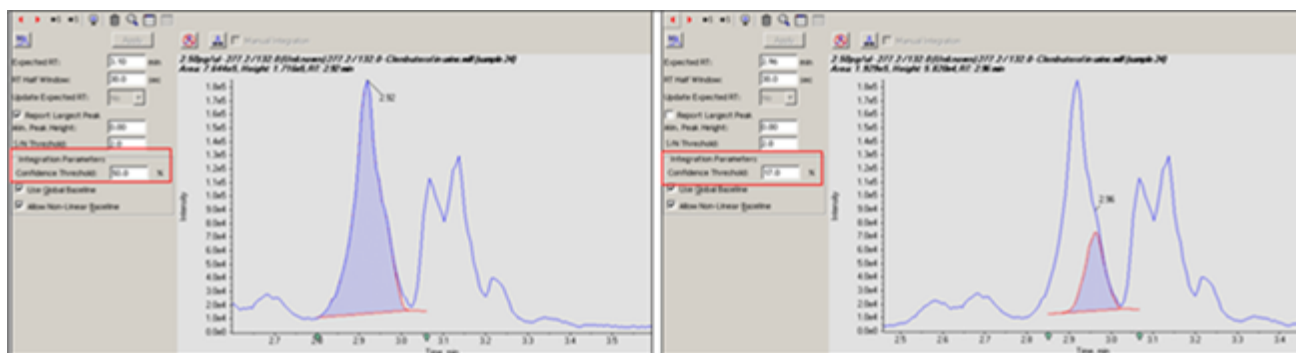


Figura A-7: Parâmetro do limite de confiança



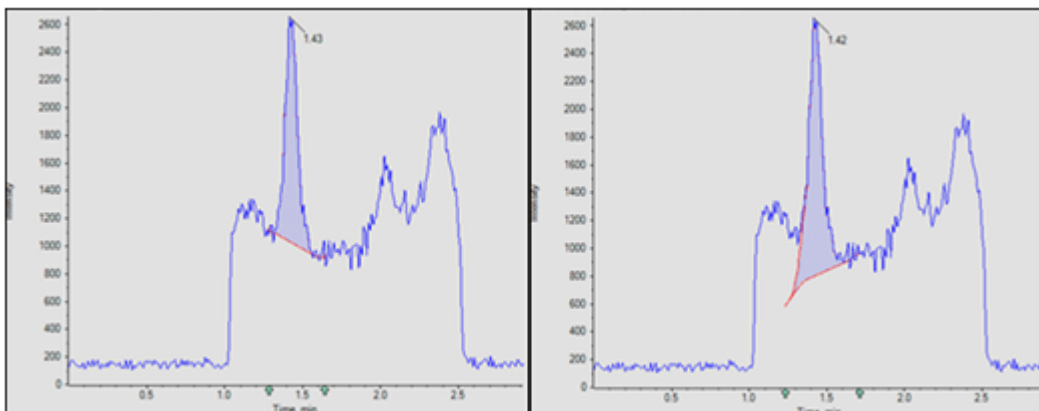
## Referências de pico local versus global

A referência de pico pode ser local ou global. Se a opção local for selecionada, o software de quantificação avaliará mudanças na referência localmente. A opção global usa o cromatograma inteiro como referência.



Para obter um exemplo que mostre onde a referência local deve ser usada, consulte a figura a seguir. O gráfico esquerdo mostra um cromatograma que foi integrado adequadamente usando a linha de base local. O gráfico direito mostra o mesmo cromatograma, integrado inadequadamente usando a linha de base global.

**Figura A-8: Uso de referência global**



## Referências de pico linear versus não linear

A referência de pico pode ser definida como linear ou não linear. A opção não linear estima a referência abaixo de cada pico. A opção linear coloca uma linha entre os pontos no começo e fim do grupo de picos específico. Para obter exemplos de referências lineares e não lineares para picos de coeluição, consulte [Figura A-9](#) e [Figura A-10](#). Os itens 1 a 4 são picos convolvidos. O item 5 mostra a referência, conforme derivado com as opções diferentes.

Uma referência não linear é recomendada para múltiplos picos. Para um único pico, a diferença entre referência linear e não linear é insignificante.

Figura A-9: Exemplo de uma referência linear

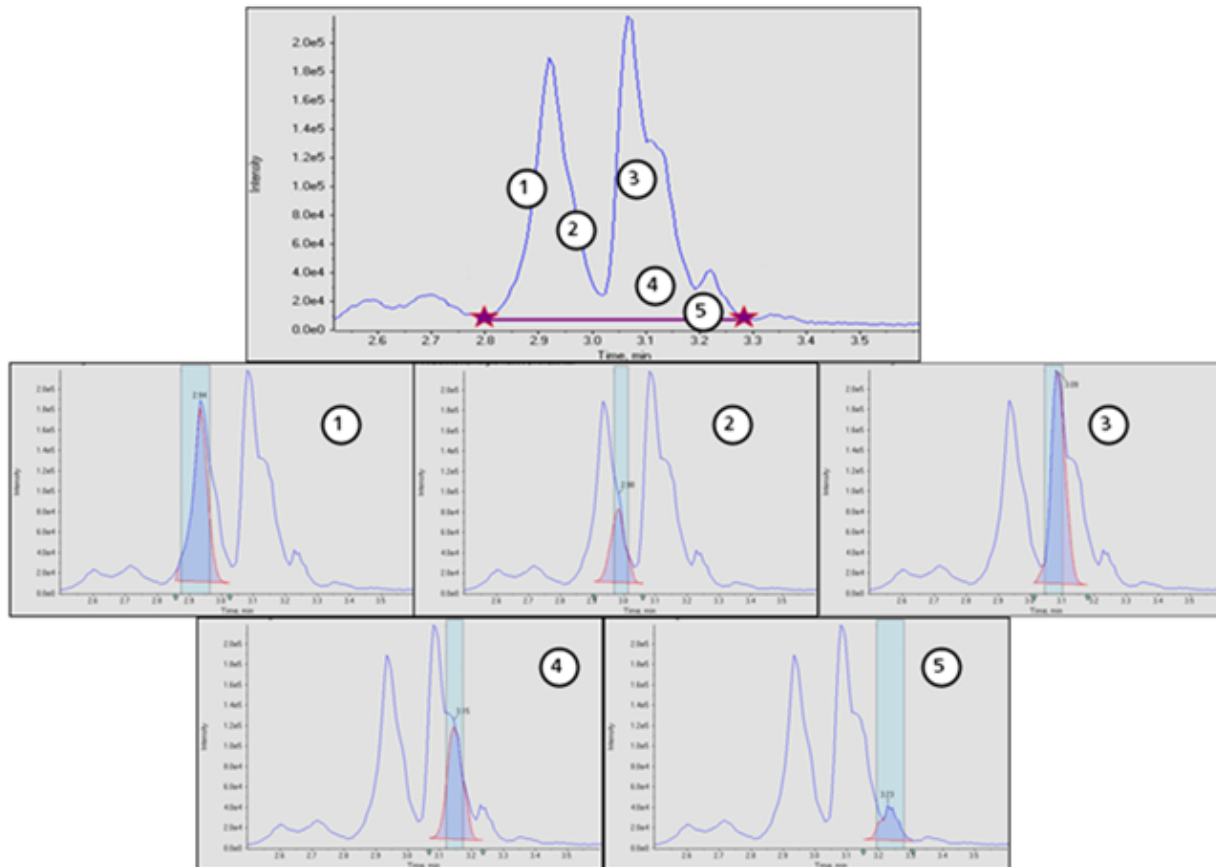
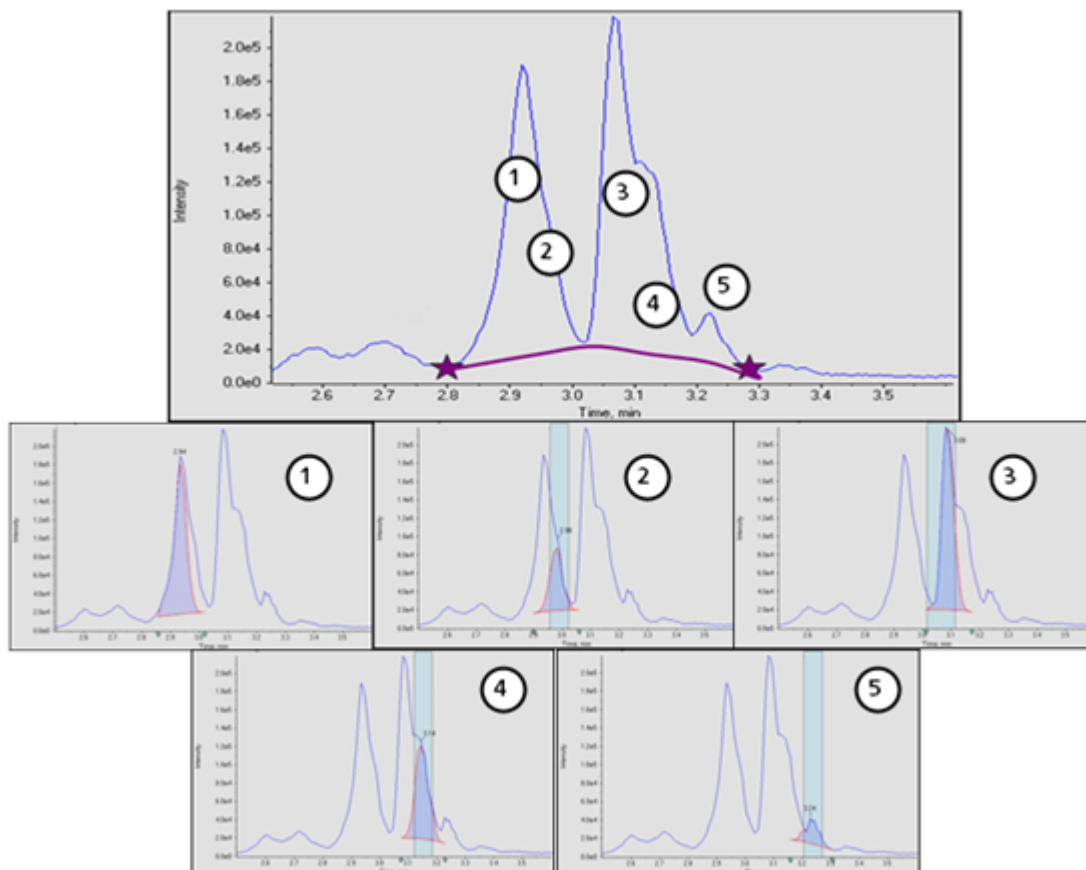


Figura A-10: Exemplo de uma referência não linear



## Parâmetros do algoritmo de integração MQ4

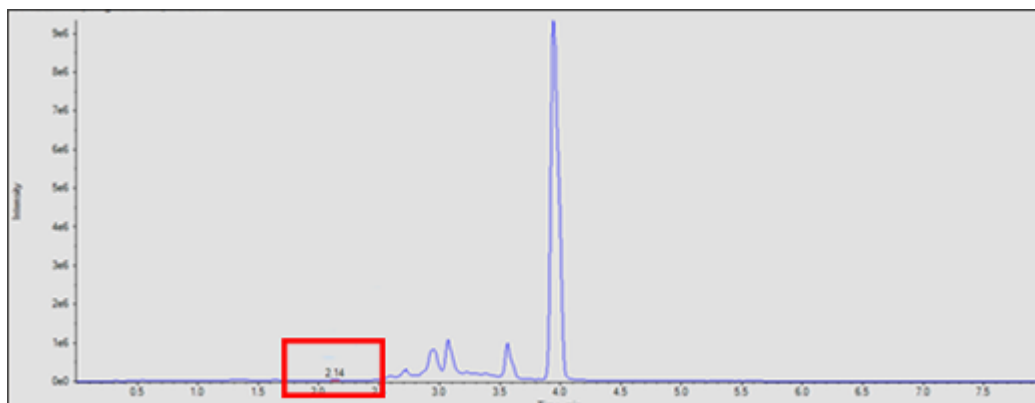
Os seguintes parâmetros são usados para identificar e reportar o pico de interesse. Para obter uma lista completa de parâmetros disponíveis, consulte o Sistema de ajuda.

### Porcentagem de ruído

Este parâmetro é usado para estimar o nível de ruído nos cromatogramas. O percentual especificado dos pontos de dados com a menor intensidade é considerado ruído.

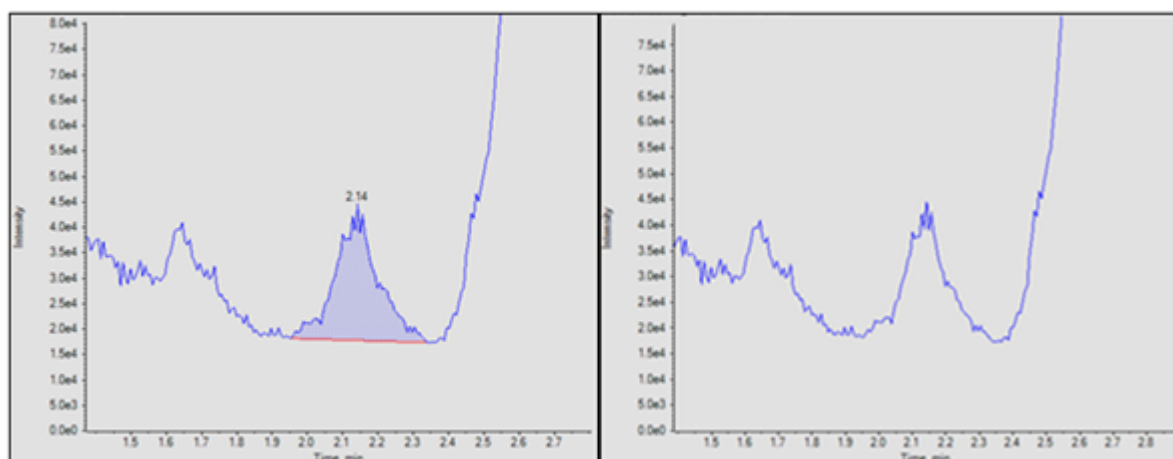
Os valores típicos variam de 20% a 60%. Se pequenos picos na presença de grandes picos não forem encontrados, o percentual de ruído deverá ser menor. A figura a seguir mostra um exemplo de um pequeno pico na presença de um pico extremamente grande. Esse pico não é encontrado quando o percentual de ruído é definido em 90%, mas é encontrado quando o percentual de ruído é definido em 40%.

**Figura A-11: Pico de interesse**



Na figura a seguir, o gráfico à esquerda mostra o percentual de ruído definido em 40%. O gráfico à direita é definido em 90%.

**Figura A-12: Níveis de ruído**



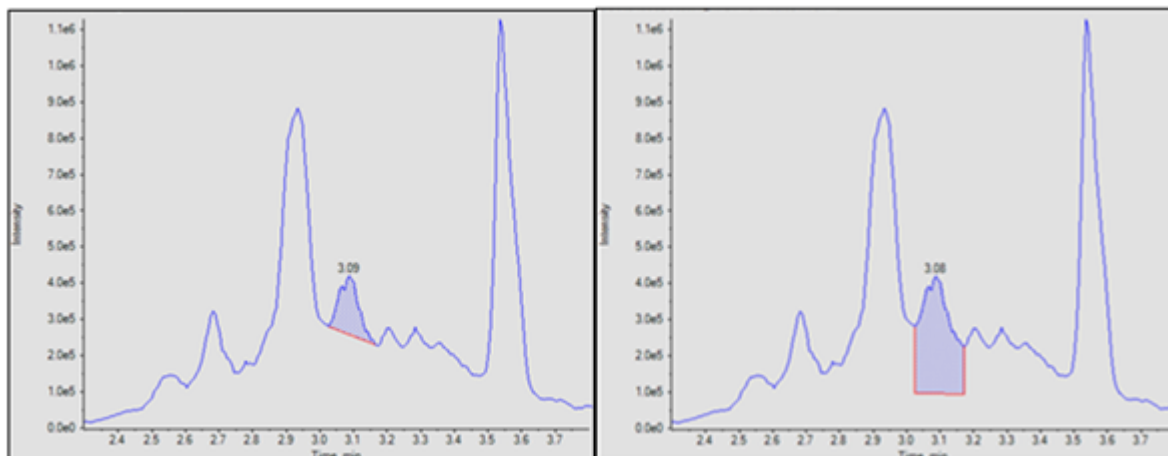
### Baseline Subtract Window

Depois da suavização, mas antes de qualquer outro processamento, os cromatogramas são subtraídos da referência para diminuir oscilações nos dados. Para cada ponto, a referência é calculada usando os pontos de dados dos lados esquerdo e direito do ponto atual com intensidade mínima (dentro da janela de subtração).

O valor exato deste parâmetro não é importante, desde que seja definido pelo menos como um pouco a mais da largura de pico esperada.

Na figura a seguir, o gráfico à esquerda mostra a janela Baseline subtraction configurada para 0,1 minuto e o gráfico à direita mostra a janela Baseline subtraction configurada para 1 minuto.

Figura A-13: Janela Baseline Subtraction



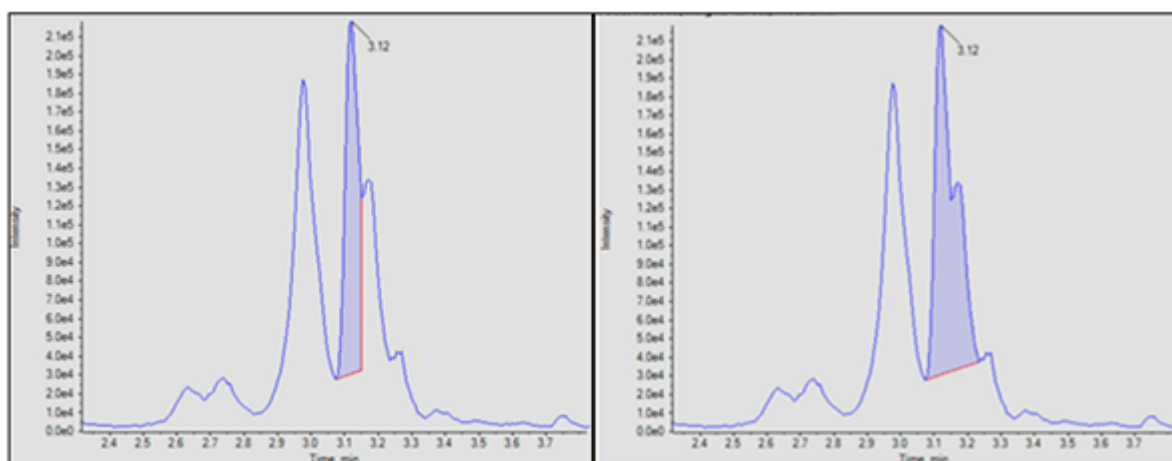
## Divisão de picos

Este parâmetro controla se um pico possivelmente ruidoso é considerado como um pico individual ou dois ou mais picos separados. Se a inclinação entre os dois picos potenciais for inferior ao valor especificado, será considerado um pico individual. Senão, dois picos serão encontrados.

Definir este parâmetro como um valor mais amplo evita que picos ruidosos sejam divididos e encontrados como dois picos separados. No entanto, um valor menor deve ser usado caso haja dois picos distintos com eluição (sobreposição) aproximada.

Na figura a seguir, o gráfico à esquerda mostra Peak Splitting definido como dois pontos. O gráfico à direita mostra Peak Splitting definido como três pontos.

Figura A-14: Divisão de picos



## Regression

A área ou altura dos picos do analito é representada em relação às concentrações conhecidas em Calibration Curve e Metric Plot. Subsequentemente, uma linha é encaixada

aos pontos. Essa linha de regressão é usada para calcular a concentração de amostras desconhecidas.

## Equações de regressão

Esta seção descreve as equações para calcular as curvas de regressão. Nas equações que seguem, o  $x$  representa a concentração do analito nas amostras Standard e o  $y$  representa a área ou altura de pico correspondente. As variáveis exatas usadas para a regressão dependem se um padrão interno está sendo usado e se a área do pico e a altura de pico são usadas conforme mostrado na tabela a seguir.

**Tabela A-1: Variáveis de regressão**

Padrão interno usado?	Área usada?	x	y
Sim	Sim	$C_a / C_{\acute{e}} / DF$	$A_a / A_{\acute{e}}$
Sim	No	$C_a / C_{\acute{e}} / DF$	$H_a / H_{\acute{e}}$
No	Sim	$C_a / DF$	$A_a$
No	No	$C_a / DF$	$H_a$

em que:

- $C_a$  = concentração real do analito
- $C_{\acute{e}}$  = concentração do padrão interno
- DF = fator de diluição
- $A_a$  = área de pico do analito
- $A_{\acute{e}}$  = área do pico do padrão interno
- $H_a$  = alturas do pico do analito
- $H_{\acute{e}}$  = altura do pico do padrão interno

## Tipos de ponderação

A tabela a seguir mostra como o fator de ponderação ( $w$ ) é calculado para um dos sete tipos de ponderação.

**Tabela A-2: Tipos de ponderação**

Weighting Type	Peso (w)
Nenhum	Sempre 1,0.
$1 / x$	Se $ x  < 10^{-5}$ então $w = 10^5$ . Ou $w = 1 /  x $ .
$1 / x^2$	Se $ x  < 10^{-5}$ então $w = 10^{10}$ . Ou $w = 1 / x^2$ .
$1 / y$	Se $ y  < 10^{-8}$ então $w = 10^8$ . Ou $w = 1 /  y $ .
$1 / y^2$	Se $ y  < 10^{-8}$ , então $w = 10^{16}$ . Caso contrário, $w = 1 / y^2$ .

Tabela A-2: Tipos de ponderação (continuação)

Weighting Type	Peso (w)
ln(x)	Se $x < 0$ , então um erro é gerado. Se $x < 10^{-5}$ então $w = \ln 10^5$ . Ou $w =  \ln x $ .
ln (y)	Se $y < 0$ , então um erro é gerado. Se $y < 10^{-8}$ então $w = \ln 10^8$ . Ou $w =  \ln y $ .

## Coeficiente de correlação

Nas equações de regressão,  $x$ ,  $y$  e  $w$  estão conforme definidos anteriormente. Todas as somas são calculadas sobre todas as amostras Standard, exceto as amostras Standard marcadas como não usadas.

O coeficiente de correlação é calculado como:

em que:

$$D_y = \sum w \sum wy^2 - (\sum wy)^2$$

- $y_c$  = valor de Y calculado usando a equação adequada para o tipo de regressão

$$D_{y_c} = \sum w \sum wy_c^2 - (\sum wy_c)^2$$

## Tipos de regressão

No espaço de trabalho Analytics, os seguintes tipos de regressão estão disponíveis:

- Média (somente painel Metric Plot)
- Mediana (somente painel Metric Plot)
- Linear ( $y = mx + b$ )
- Linear através do zero ( $y=mx$ )
- Média de fator de resposta
- Quadrático ( $y = a^2 + bx + c$ )
- Energia
- Wagner
- Hill

**Nota:** A opção **Remove outliers automatically from the calibration curve** na caixa de diálogo Regression Options no painel Calibration Curve aplica automaticamente as regras de remoção automática de valores discrepantes aos componentes de interesse selecionados. Consulte Help.

### Linear

A equação de calibração linear é a seguinte:

$$y = mx + b$$

O coeficiente angular e o coeficiente linear são calculados das seguintes formas:

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

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

em que:

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

### Linear através do zero

A equação de calibração linear através do zero é a seguinte:

$$y = mx$$

O coeficiente angular é calculado da seguinte forma:

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

### Média de fator de resposta

A calibração do fator de resposta média é:

$$y = mx$$

Essa é a mesma equação usada na calibração da equação linear através do zero. Entretanto, o coeficiente angular é calculado de maneira diferente:

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

e o desvio padrão do fator de resposta é:

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

em que:

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

---

**Nota:** Os pontos cujo valor do x for zero serão excluídos das somas.

---



Se houver alguma linearidade e alguma curvatura na linha dos pontos, use então regressão de potência em vez de regressão quadrática ou linear para produzir uma linha em algum lugar entre os ajustes.

## Quadrática

A equação de calibração quadrática é a seguinte:

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

Os coeficientes polinomiais são calculados das seguintes maneiras:

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

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

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

em que:

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

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

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

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

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

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

## Energia

A equação de calibração da função de potência é:

$$y = ax^p$$

As equações para calibração linear são usadas como descritas acima para calcular o coeficiente angular (m) e coeficiente linear (b) exceto pelo x, que nessas equações é substituído pelo ln x e y é substituído por ln y. Quando estiver terminado, a e p são calculados da seguinte forma:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Se algum dos valores de x ou y for negativo ou zero, um erro será relatado.

### Wagner

A equação da calibração Wagner é:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

As equações para a calibração quadrática são usadas conforme descrito acima para calcular  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_2$ , exceto  $x$ , que nessas equações é substituído por  $\ln x$  e  $y$  é substituído por  $\ln y$ .

Se algum dos valores de  $x$  ou  $y$  for negativo ou zero, um erro será relatado.

### Hill

A equação da calibração Hill é:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

Não é possível fornecer uma função analítica para resolução de  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $n$ . Em vez disso, os coeficientes são determinados usando o método Levenberg-Marquardt iterativo.

## Remoção automática de valores discrepantes

Um recurso opcional permite que o software remova automaticamente valores discrepantes da curva de calibração. Além de economizar tempo, esse recurso é útil para aplicações que possuem vários compostos com diferentes faixas lineares e sensibilidades.

Quando este recurso está ativado, o software pesquisa, de maneira iterativa, todos os pontos de dados para identificar uma faixa inicial que consista em quatro pontos consecutivos e ofereça a melhor regressão linear possível e satisfaça as regras especificadas pelo usuário para a remoção de valores discrepantes. O algoritmo calcula várias regressões para todas as permutações dos pontos de partida. Ele considera todas as regressões válidas que satisfaçam as regras especificadas pelo usuário e faz com que todas passem pela sequência de expansão. Para todas as faixas iniciais válidas, o sucesso de cada expansão depende do número total de pontos utilizados, da faixa dos níveis usados e do ponto com o pior erro de precisão absoluta na regressão, antes e depois da expansão. A regressão que abranger a maior faixa e satisfizer as regras é a regressão "vencedora".

---

**Nota:** Se não houver quatro pontos de dados, o software utilizará três. O algoritmo não será aplicado se houver menos de três pontos disponíveis.

---

As regras de remoção automática de valores discrepantes são definidas no método de processamento e incluem:

- Correlação de coeficiente mínima ( $r$ )

---

**Nota:** Esta opção usa a correlação de coeficiente, e não o coeficiente de determinação ( $r^2$ ).

---

- Erro de precisão máximo permitido para réplicas de um padrão com o menor nível de quantificação (LLOQ)
  - Erro de precisão máximo permitido para padrões acima de LLOQ
-

- Coeficiente de variação percentual máximo (CV) para várias réplicas de um padrão em LLOQ

---

**Nota:** Se o CV percentual for superior ao valor especificado, o algoritmo removerá réplicas em ordem decrescente de erro de precisão até que o CV percentual das réplicas restantes seja inferior a esse valor.

---

- CV percentual máximo para várias réplicas de um padrão em todos os níveis acima de LLOQ

---

**Nota:** Se o CV percentual for superior ao valor especificado, o algoritmo removerá réplicas em ordem decrescente de erro de precisão até que o CV percentual das réplicas restantes seja inferior a esse valor.

---

- Se o número total especificado de valores discrepantes exclui valores discrepantes abaixo de LLOQ e acima do limite superior de quantificação (ULOQ)
- Número máximo de valores discrepantes que podem ser removidos para um nível de concentração
- Número total de valores discrepantes que podem ser removidos de uma curva de calibração

---

**Nota:** Esse algoritmo é aplicado a todos os padrões, incluindo os que foram excluídos manualmente.

---

---

**Nota:** Se o número de réplicas usado para produzir a regressão for diferente para cada nível de padrão, o recurso de remoção automática de valores discrepantes não funcionará perfeitamente e só deverá ser usado como ponto de partida. Revise cada curva de calibração manualmente.

---

---

**Dica!** Certifique-se de que os limites de tolerância de precisão dos padrões que constam nos Critérios de aceitação do método de processamento correspondam aos limites que constam na caixa de diálogo Rules for Automatically Removing Outliers for Calibration Standards.

---

## Results Tables

Uma tabela de resultados é uma compilação das informações quantitativas e qualitativas associadas a um conjunto de amostras. Nela estão incluídos, entre outros, os cálculos para concentração e precisão determinados como resultado da interpolação da curva de calibração padrão. Os resultados da pesquisa na biblioteca, os resultados de localização de fórmulas e outros resultados de análise qualitativa também estão disponíveis na tabela de resultados. Área, altura e outras características numéricas podem ser exibidas. O número e tipo das colunas nas tabelas de resultados podem ser editadas para visualização simplificada.

## Curvas de calibração

Uma curva de calibração, também conhecida como curva de concentração padrão, é um método para determinar a concentração de uma substância em uma amostra desconhecida por comparação da amostra desconhecida com um grupo de amostras padrões de uma concentração conhecida. A curva de calibração é um gráfico que mostra como o instrumento responde (o sinal analítico) às variações na concentração do analito (a substância a ser mensurada). O operador prepara uma série de padrões através de uma variação de concentrações próximas da concentração esperada do analito na amostra desconhecida.

Padrões de calibração são usados para formar curvas de calibração. Leituras não feitas ou incorretas em algumas amostras de calibração podem indicar problemas com a corrida analítica. Siga os métodos de aceitação encontrados na literatura e guias de agências regulatórias para a criação de uma curva de calibração. Exemplos de boas práticas na preparação de curvas de calibração incluem:

- Preparação de padrões de calibração em uma matriz em branco em que o analito será mensurado.
- Geração de uma curva de calibração para cada analito ser mensurado.
- Confirmação de que a variação de concentração esperada do analito esteja coberta, incluindo amostras típicas e atípicas.
- Uso de seis a oito concentrações diferentes do padrão para geração da curva.

Esta não é uma lista completa e outros guias devem ser usados para determinar a melhor prática de desenvolver a curva de calibração para o laboratório.

---

**Nota:** Em algumas execuções analíticas, são usados padrões de calibração de ponto único. Calibrações de ponto único são realizadas utilizando uma matriz em branco e uma concentração padrão única. A relação entre a resposta do instrumento e a concentração do analito é determinada pela linha criada entre esses dois pontos. Os métodos de aquisição e processamento devem ser validados antes de serem aceitos para esta finalidade.

---

## Proporção sinal/ruído

Ao realizar processamento de dados de espectrometria de massas quantitativa, é importante determinar se um pico específico é significativo ou não, em que *significativo* normalmente significa *ultrapassando o ruído de fundo*.

## Cálculos de ruído relativo e sinal/ruído

Geralmente, a altura do pico é comparada ao ruído de fundo medido em uma região livre de picos, onde o ruído é tipicamente estimado como uma ou três vezes o desvio padrão dos pontos de dados nessa faixa. Essa abordagem está longe de ser ideal pelos seguintes motivos:

- Ela é subjetiva, uma vez que a região de ruído é selecionada manualmente.
- Uma região de fundo sem um pico pode não existir ou a região pode ser muito estreita para uma estimativa acurada do ruído.

- O ruído na posição do pico pode ser bem diferente daquele na região de ruído selecionada.
- O fator de "um ou três" também é subjetivo e diferentes autoridades possuem diferentes recomendações.
- O ruído aparente pode ser alterado se os dados foram pré-processados. Por exemplo, suavizados ou limitados.

O conceito de Ruído relativo ( $R_n$ ) facilita o desenvolvimento de um método simples para calcular o ruído esperado em qualquer ponto nos dados, para comparar com o sinal medido. Esta é uma métrica objetiva e robusta que pode ser usada para calcular o sinal/ruído (S/N) e para avaliar e comparar o desempenho do instrumento e do ensaio. Há muitas aplicações do conceito de ruído relativo, uma das quais é o cálculo de S/N.

O algoritmo básico funciona da seguinte forma:

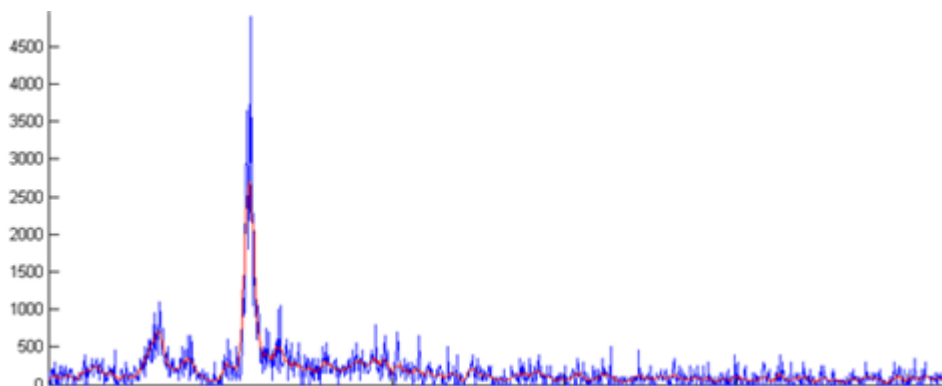
1. Elabora um modelo de ruído que permitirá ao usuário calcular o ruído esperado em qualquer ponto no registro de dados, considerando o nível do sinal subjacente nesse ponto.

O modelo de ruído pode ser determinado a partir de considerações teóricas ou pode ser modelado a partir de medidas reais para um sistema específico. Para detectores de contagem de pulso, o desvio padrão de um sinal  $e$ , portanto, o ruído esperado, é proporcional à raiz quadrada do sinal  $e$ , desse modo, varia com o sinal. Em outros sistemas, haverá um componente de "ruído branco" constante, possivelmente combinado com um componente dependente de intensidade.

2. Estima o sinal subjacente a partir do sinal medido.

Essa tarefa pode ser atingido de muitas formas, mas a mais simples é gerar uma versão suavizada dos dados. Consulte a figura: [Figura A-15](#).

**Figura A-15: Sobreposição de dados brutos e suavizados**

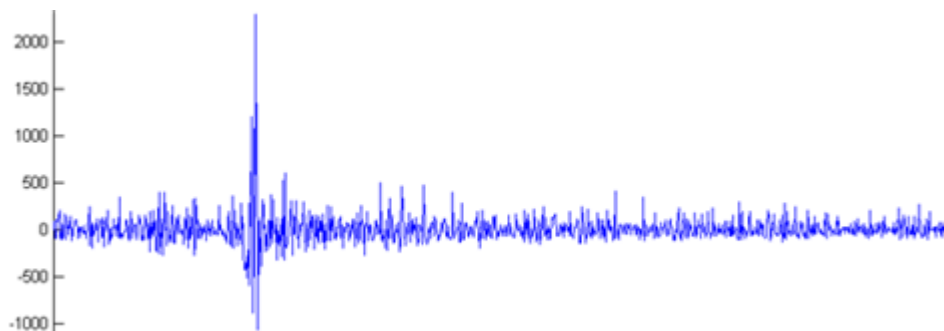


3. Mede o ruído real entre os dados usando todos os pontos, picos e fundo.

Isso é atingido ao subtrair a estimativa do sinal subjacente a partir do sinal medido em cada ponto nos dados onde o sinal suavizado foi subtraído do original. O resultado é conhecido como ruído delta. A faixa do ruído delta é razoavelmente constante, exceto

onde há grandes picos, pois o ruído é dependente do sinal e, portanto, maior onde o sinal é maior. Consulte a figura: [Figura A-16](#).

**Figura A-16: Gráfico de valores de ruído delta para cada ponto de dados**



4. Em cada ponto de dados, calcula a razão do ruído medido em relação ao ruído esperado.

Ou seja, em cada ponto de dados, divide o ruído medido na etapa [pelo valor que o modelo de ruído estima. Nesse caso, a raiz quadrada da intensidade](#). Se o modelo de ruído for bom, o software gera uma série de valores que permanecem em sua maioria ligados por alguns limites. Consulte a figura a seguir. Essa figura também mostra o gráfico de

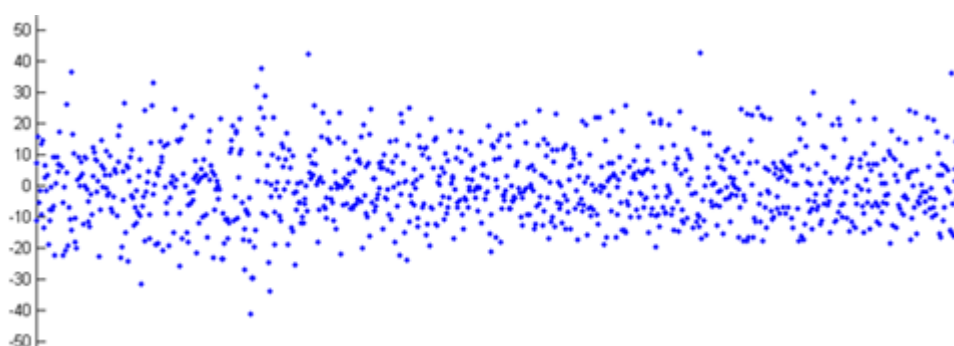
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

---

**Nota:** Essa etapa reduz a grande variação no ruído delta e os resultados em um conjunto bem restrito de valores.

---

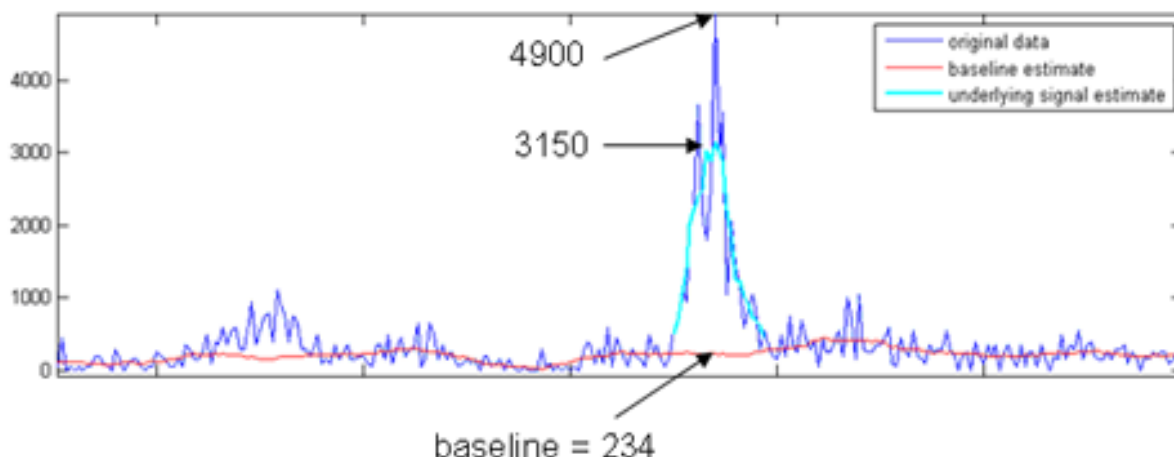
**Figura A-17: Modelo de ruído**



5. Calcula o desvio padrão dos valores de razão. Este é o Rn, uma estimativa da relação mais provável entre o ruído delta real e o previsto pelo modelo. Na figura anterior, isso resulta em um valor de 9,5.

A figura a seguir mostra um exemplo de como o ruído relativo pode ser usado para calcular o S/N.

**Figura A-18: Sobreposição de dados brutos, estimativas de sinal subjacente e estimativas de referência**



Conforme descrito anteriormente:

$$\text{noise} = R_n \times \sqrt{(\text{baseline})}$$

Neste exemplo:

$$\text{noise} = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Se o ápice do pico for usado como o sinal, então o S/N é 34 (4900/145) e, se a altura do sinal suavizado for usada, então o S/N será 22 (3150/145).

Ao relatar o S/N, o algoritmo de integração MQ4 usa o procedimento descrito aqui e o ápice do pico como o sinal. Como o algoritmo de integração AutoPeak está ajustando um modelo ao pico, ele usará a altura do perfil ajustado. Isso resulta em um S/N relatado menor. No entanto, este é um valor mais preciso, pois é menos afetado por possíveis picos de ruído. O algoritmo de integração do AutoPeak também possui uma abordagem mais sofisticada para a previsão de referência, portanto, por esses dois motivos, os valores de S/N relatados pelos dois algoritmos não são idênticos, embora sejam geralmente semelhantes.

Em resumo, comparado à abordagem usual de previsão de ruído como o desvio padrão de uma região de fundo, a abordagem de ruído relativo para calcular o S/N possui as seguintes vantagens:

- Ela é muito menos subjetiva, pois uma região de fundo não precisa ser selecionada manualmente.
- Um S/N preciso pode ser estimado mesmo se não houver qualquer região sem picos do cromatograma.
- Para os algoritmos de integração AutoPeak e Summation, a referência e, portanto, o ruído, é estimado próximo do pico de interesse. Para o algoritmo de integração MQ4, a referência é a intensidade do ponto de dados na porcentagem de ruído especificada pelo usuário. Por exemplo, se a porcentagem de ruído especificada pelo usuário for 40%

e houver 100 pontos de dados, o algoritmo de integração MQ4 organiza os pontos de dados da menor para a maior intensidade e usa a intensidade dos pontos de dados com a quadragésima menor intensidade.

Isso pode fazer uma grande diferença para o valor S/N relatado, pois a região de fundo selecionada para a abordagem usual pode ser muito mais quieta que o fundo próximo ao pico. Conforme descrito anteriormente, o S/N calculado usando a abordagem de Relative Noise pode fornecer valores menores que a abordagem usual. No entanto, eles são valores mais precisos e úteis. Consulte [Figura A-18](#).

Para tornar a coluna **Signal / Noise** visível na Tabela de resultados, consulte [Personalize a Results Table](#).

### **Observação sobre sinal/ruído ao usar o algoritmo de integração SignalFinder**

Como o AutoPeak calcula o sinal para ruído mais precisamente (e, portanto, prevê mais precisamente CVs), se a abordagem de sinal para ruído 1-sigma for usada, considere diminuir o valor de sinal para ruído o mínimo aceitável em qualquer procedimento operacional padrão (SOP), com base nos dados empíricos do laboratório.

### **Sinal para ruído usando pico a pico**

Se esse algoritmo de sinal para ruído for usado, o software calcula a proporção de sinal para ruído ao assumir o desvio padrão de todos os pontos de dados cromatográficos entre os tempos de fundo de início e de fim especificados. O software calcula a proporção de sinal para ruído para o cromatograma ativo, subtrai o sinal de fundo médio do pico selecionado e, em seguida, divide o sinal subtraído pelo nível de ruído de pico a pico. Isso diferencia as regiões de ruído e pico nas intensidades máximas de cada região. Após a conclusão, o cromatograma ativo é rotulado com a proporção de sinal para ruído.

### **Sinal para ruído usando o desvio padrão**

Quando esse algoritmo de sinal para ruído é usado, o software calcula a proporção de sinal para ruído dos picos cromatográficos e os rotula. Esse algoritmo requer que duas regiões sejam selecionadas no cromatograma:

- A região do ruído
- O pico de interesse

O software, então, determina qual região contém o pico e qual região contém o ruído com base nas intensidades máximas em cada seleção. Ele subtrai a intensidade média do sinal de fundo e, em seguida, divide o sinal subtraído por um fator especificado pelo usuário multiplicado pelo desvio padrão da região de ruído.

### **Definir regiões de ruído**

Use este procedimento para definir regiões de ruído se o desvio padrão ou algoritmo pico a pico for usado.



**Nota:** Somente o algoritmo sinal para ruído pode ser usado em uma Tabela de resultados. Para aplicar um algoritmo sinal para ruído diferente aos dados, altere os padrões do projeto e, em seguida, crie uma nova new Tabela de resultados.

---

1. Nas configurações padrão do projeto, selecione o algoritmo de sinal para ruído **Standard Deviation** ou **Peak-to-Peak**.

**Dica!** Para abrir as configurações padrão do projeto, clique em **Projects > Project default settings**.

---

2. Criar um método de processamento.
3. Na página Integration, clique em **Options > Show Noise Regions**.
4. (Se necessário) Use o mouse para ajustar a região do ruído.

**Nota:** A região do ruído deve ser definida para cada transição.

---

5. Processar os dados.
6. No painel Peak Review, clique em **Options > Show Noise Regions**.
7. (Se necessário) Use o mouse para ajustar a região do ruído.

## Colunas calculadas

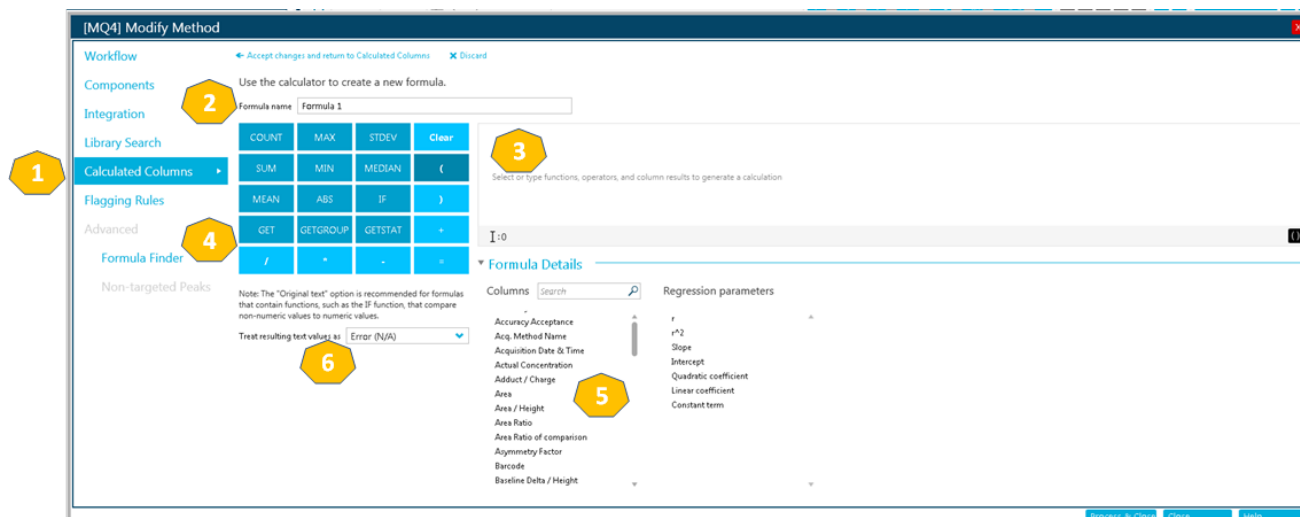
Colunas calculadas são fórmulas que resultam em novas colunas personalizadas que são adicionadas a uma Results Table. Após uma fórmula ser criada e os dados serem processados (ou reprocessados), o resultado da fórmula é mostrado em uma nova coluna personalizada.

## Navegando na interface Calculated Column

Colunas calculadas são criadas em um método de processamento. Elas podem ser importadas e exportadas como arquivo `f_rml` para uso ou compartilhamento futuro.

A figura a seguir mostra a interface para o editor de fórmula.

Figura A-19: UI Calculated Columns



Item	Descrição
1	A etapa <b>Calculated Columns</b> no fluxo de trabalho do método de processamento. Clique para abrir a página Calculated Columns. Depois, clique em <b>Add Formula</b> (não mostrado)
2	O campo <b>Formula name</b> . Digite um nome para a fórmula. <b>Nota:</b> O nome da fórmula não pode conter os nomes das funções na calculadora, colchetes ou parênteses.
3	O campo <b>Formula</b> .
4	Uma calculadora que contém funções e operadores normalmente usados. Os seguintes operadores adicionais podem ser digitados no campo da fórmula: <ul style="list-style-type: none"> <li>• &gt; (maior que)</li> <li>• &gt;= (maior ou igual a)</li> <li>• &lt; (menor que)</li> <li>• &lt;= (menor ou igual a)</li> <li>• != (diferente de)</li> </ul> Para obter mais informações sobre esses operadores e funções, consulte o <i>Sistema de ajuda</i> .
5	Parâmetros de regressão e colunas da Results Table disponíveis. <b>Nota:</b> Esta lista não está disponível nas tabelas <code>qsession</code> .

Item	Descrição
6	<p>O menu <b>Treat resulting text values as</b> permite que o usuário configure como as entradas do texto são processadas. Essa opção é importante em colunas da Results Table que possam conter resultados numéricos e textuais.</p> <p>Por exemplo, as colunas de concentração calculada podem conter valores numéricos juntamente com valores não numéricos como N/A, degenerar e infinito.</p>

**Nota:** Quando o usuário começa a digitar a fórmula que usa uma matriz de amostras, um item de seleção de amostras fica disponível.

## Extração simples de informações não padrão

O recurso de colunas calculadas permite que os usuários mostrem informações que não estão disponíveis por padrão na Results Tables.

Por exemplo, para mostrar  $R^2$  como uma coluna da Results Table, o usuário pode criar uma fórmula igual a  $R^2$ .

**Figura A-20: Criação de uma coluna personalizada com colunas calculadas**

← Accept changes and return to Calculated Columns    ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF	)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

I:5

### Formula Details

Columns



Regressão parameters

Accuracy  
Accuracy Acceptance  
Acq. Method Name  
Acquisition Date & Time  
Actual Concentration



r  
r^2  
Slope  
Intercept  
Quadratic coefficient

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as

## Aritmética simples

Fórmulas simples podem ser criadas para realizar operações matemáticas básicas.

### Exemplo: R<sup>2</sup>

```
[r] * [r]
```

Nesse exemplo, o valor R<sup>2</sup> é reproduzido usando o operador de multiplicação (\*) para multiplicar o valor de R por ele mesmo.

### Exemplo: pontos por segundo coletados

```
[Points Across Baseline] / (([End Time] - [Start Time]) * 60)
```

Nesse exemplo, os pontos na linha de base são divididos pelos segundos do início ao fim de um pico cromatográfico integrado. Essa fórmula usa os operadores de divisão (/), multiplicação (\*) e subtração (-).

## Funções mais complexas

Existem muitas outras funções e estruturas de controle. Algumas mais comuns são **MEAN()**, **MAX()** e **MIN()** e são mostradas na calculadora em uma barra de fórmula.

Para obter uma lista completa de informações sobre sintaxe, operadores e funções, consulte o *Sistema de ajuda*.

### Exemplo: MEAN([Area]) para Padrões

Ao usar uma função que opera em todos os valores, o usuário pode selecionar as amostras a serem incluídas no cálculo.

Figura A-21: Obter a média somente da área de pico de amostras padrão

← Accept changes and return to Calculated Columns   ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name:

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF	)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

MEAN([Area])

I:12

Formula Details

Columns  🔍

Accuracy

- Accuracy Acceptance
- Acq. Method Name
- Acquisition Date & Time
- Actual Concentration
- Adduct / Charge
- Area
- Area / Height
- Area Ratio
- Area Ratio of comparison
- Asymmetry Factor
- Barcode

Regression parameters

- r
- r<sup>2</sup>
- Slope
- Intercept
- Quadratic coefficient
- Linear coefficient
- Constant term

MEAN value will be calculated using the following sample types:

- Unknowns
  - Only if the sample name contains...
- Standards
  - Only if the sample name contains...
- QCs
  - Only if the sample name contains...
- Blanks
  - Solvent
  - Blank
  - Double blank
  - Only if the sample name contains...

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as:

### Exemplo: combinação de funções

Aritmética simples e funções mais complexas podem ser combinadas. Por exemplo, para calcular os pontos médios por segundo coletado, use a fórmula a seguir:

```
MEAN([Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60))
```

## Declarações IF

A função **IF** realiza um teste lógico e retorna um valor para um resultado verdadeiro e outro para um resultado falso. As funções **IF** aninhadas podem ser usadas para testar mais de uma condição. A função **IF** pode ser combinada com outras funções lógicas, como **and** e **or** para ampliar um teste lógico.

**Nota:** "&&" e "||" podem ser usados para **and** e **or**, respectivamente. Os operadores **and** e **or** devem ficar entre espaços, mas os operadores && e || não precisam.

A sintaxe básica da declaração **IF** é a seguinte:

```
if(<condition>;<value if true>;<value if false>)
```

- **<condition>** é um valor ou expressão lógica que pode ser avaliada como verdadeiro ou falso.
- **<value if true>** é um valor a ser retornado e mostrado na coluna correspondente da Results Table quando **<condition>** é avaliada como verdadeira.
- **<value if false>** é um valor a ser retornado e mostrado na coluna correspondente da Results Table quando **<condition>** é avaliada como falsa.

## Teoria da operação - Software

---

**Nota:** O símbolo da função **IF** pode ser selecionado na calculadora, digitado ou copiado de outra fonte. Ela pode ser usada na sintaxe **if** ou **IF**.

---

A função **IF** permite que outras funções numéricas, como **MEAN**, **STDEV** e assim por diante também sejam usadas na fórmula, nas expressões *<condition>*, *<value if true>*, ou *<value if false>*.

### Exemplo: *<condition>*

Alguns exemplos de uma *<condition>* incluem:

```
[Peak Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

```
[Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2
```

### Exemplo: *<value if true>* e *<value if false>*

*<value if true>* e *<value if false>* pode ser número ou texto.

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT window'; 'not applicable')
```

### Exemplo: valor médio para área padrão interna

Nesse exemplo, o valor médio da área padrão interna (PI) é calculado nas amostras desejadas e comparado a um valor de 1e6. O valor da área PI principal mostrado na coluna da Results Table se a **MEAN ([IS Area])** for maior que 1e6, se a *<condition>* for verdadeira. Se **MEAN ([IS Area])** for menor do que 1e6, ou seja, se a *<condition>* for falsa, a coluna da Results Table conterá **Review IS performance**, o *<value if false>*.

```
IF(MEAN([IS Area])>=1e6;'MEAN([IS Area])';'Review IS performance')
```

---

**Nota:** Somente as funções **IF** podem conter vários cálculos.

---

## Tratar valores do texto resultante como

A opção **Treat resulting text values as** determina como o texto é interpretado em uma coluna personalizada da Results Table que contém texto ou uma combinação de números e texto. Por exemplo, a coluna **Sample Type** contém somente texto, a coluna **Precursor Mass** contém somente valores numéricos, e a coluna **Calculated Concentration** pode conter valores numéricos e texto.

Dependendo das funções usadas em uma fórmula, a opção **Treat resulting text values as** habilita a interpretação específica dos valores de texto na coluna em que o cálculo é baseado. As opções incluem:

- **Zero**

- 
- **Ignore (blank)**
  - **Error (N/A)**
  - **Original text**
- 

**Nota:** Para obter mais informações sobre essas opções, consulte o *Sistema de ajuda*.

---

Se os cálculos forem baseados nas funções **COUNT**, **MAX**, **STDEV**, **SUM**, **MIN**, **MEDIAN**, **GET**, **GETGROUP**, **SLOPE**, **INTERCEPT**, **MAD** ou **GETSTAT**, as opções recomendadas serão **Zero**, **Ignore (blank)** ou **Error (N/A)**. Essas opções também são recomendadas nas declarações **IF** quando a fórmula contém colunas em que se esperam valores numéricos.

**Original text** é a opção recomendada nas declarações **IF** em que os componentes das expressões *<condition>*, *<value if true>* e *<value if false>* podem ser numéricos e textuais, especialmente quando as funções adicionais são usadas.

---

**Nota:** Nas declarações **IF** com mais de uma *<condition>*, falha em avaliar sequer um resultado de *<condition>* em um resultado *<value if false>* na coluna personalizada da Results Table.

---

### Exemplo

Neste exemplo, as colunas usadas na fórmula podem conter valores textuais e numéricos. Portanto, a opção **Original text** é recomendada.

```
IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated Concentration];  
'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))<=15;  
'Low Range';IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated  
Concentration]  
'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))  
<=65;'Normal Range';'Over normal range'))
```

Essa fórmula **IF** contém as colunas **Sample Type** e **Calculated Concentration**. Os valores na coluna **Sample Type** devem ser tratados como **Original text**. Para a coluna **Calculated Concentration**, pode ser necessário tratar valores não numéricos como **<0** e **Degenerate** como **Zero**.

Como valores não numéricos podem ser tratados de forma diferente, recomendamos que o usuário divida a fórmula em várias fórmulas menores, para um controle mais refinado dos valores não numéricos.

# Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato

## B

Se o fechamento de contato estiver configurado no sistema, ele poderá ser usado para calibrar o sistema nos modos de lote e manual:

- Modo de lote: o sistema pode ser calibrado com o CDS ou um método de LC. Consulte [Calibrar o sistema em modo de lote](#).
- Modo manual: o sistema pode ser calibrado com o CDS ou um método de LC. Para iniciar o método, clique em **Start** ou **Start with LC** no espaço de trabalho MS Method. Quando o status mudar para **Load**, inicie a injeção no dispositivo de LC.

---

**Nota:** O espaço de trabalho MS Tune não aceita o recurso de fechamento de contato. O MS Tune não espera pelo sinal de fechamento de contato.

---

## Calibrar o sistema em modo de lote

Utilize um CDS ou um método de LC para calibrar o sistema.

### Calibração do sistema usando o CDS

Se o sistema estiver se comunicando com um dispositivo externo por meio de fechamento de contato, siga estas diretrizes para calibrar o sistema usando o CDS:

- Configure as propriedades de autocalibração, inclusive o número de amostras entre calibrações.
- Sincronize os métodos no sistema de LC e no espectrômetro de massas para dar tempo suficiente para a calibração entre amostras. As seções a seguir descrevem duas diferentes opções para fazer isso.
- Depois de enviar o lote, aguarde a conclusão da calibração inicial e, depois, quando o sistema entrar no estado de carregamento, inicie a injeção no dispositivo externo.

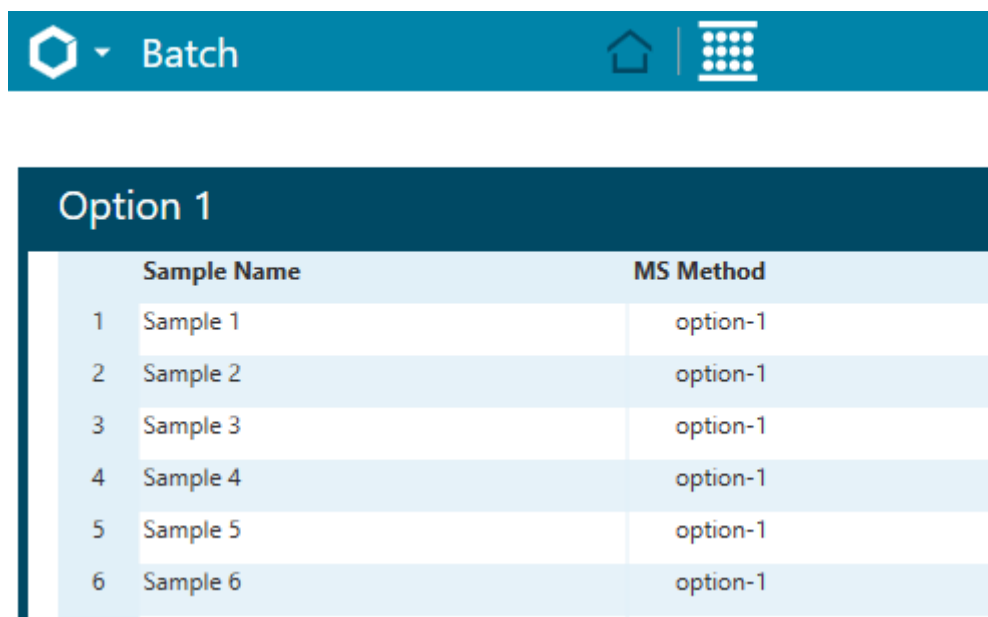
### Opção 1

Para sincronizar o sistema de LC e o espectrômetro de massas, certifique-se de que os métodos de LC sejam, pelo menos, dois minutos mais longos que os métodos do espectrômetro de massas.

Os exemplos a seguir mostram o lote e a fila no SCIEX OS e a programação correspondente no dispositivo externo de um lote em que a calibração é executada após cada terceira amostra.

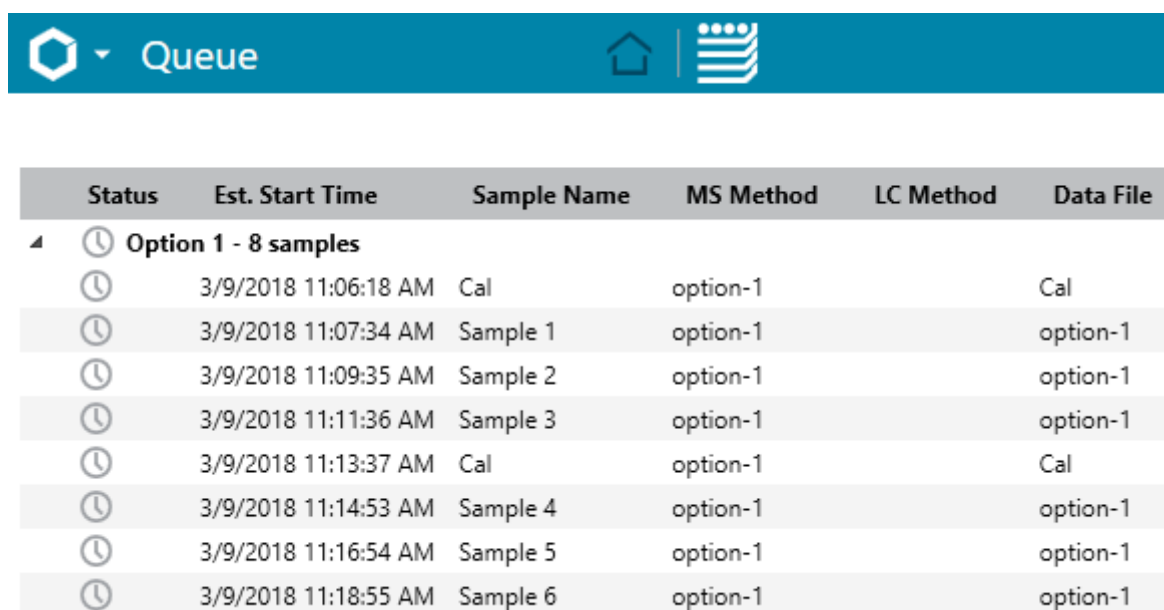


Figura B-1: Calibração CDS: exemplo de lote



	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	option-1
2	Sample 2	option-1
3	Sample 3	option-1
4	Sample 4	option-1
5	Sample 5	option-1
6	Sample 6	option-1

Figura B-2: Calibração CDS: exemplo de fila



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 1 - 8 samples				
⌚	3/9/2018 11:06:18 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:07:34 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:09:35 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:11:36 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:37 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:14:53 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:16:54 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:18:55 AM	Sample 6	option-1		option-1

Tabela B-1: Sequência de amostras no dispositivo externo

Tempo (mm:ss)	Injeção
00:00	Amostra 1
12:00	Amostra 2
24:00	Amostra 3
36:00	Amostra 4

## Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato

**Tabela B-1: Sequência de amostras no dispositivo externo (continuação)**

Tempo (mm:ss)	Injeção
48:00	Amostra 5
60:00	Amostra 6

### Opção 2

Esta opção é adequada para um fluxo de trabalho com um método de LC curto.

Siga estas diretrizes para sincronizar o sistema de LC com o espectrômetro de massas:

- Para todas as calibrações, exceto a primeira do lote, configure o dispositivo externo para injetar uma amostra em branco sempre que estiver programada a ocorrência de uma calibração. Por exemplo, se três amostras forem adquiridas entre calibrações, certifique-se de que cada quarta injeção seja uma amostra em branco.
- Certifique-se de que o tempo de execução da amostra em branco no dispositivo externo seja de 2 minutos ou mais. (A calibração CDS demora 2 minutos.) Certifique-se de que a duração do método seja inferior ou igual ao tempo entre injeções.

Os exemplos a seguir mostram o lote e a fila no SCIEX OS e a programação correspondente no dispositivo externo de um lote em que a calibração é executada após cada terceira amostra.

**Figura B-3: Calibração CDS: exemplo de lote**

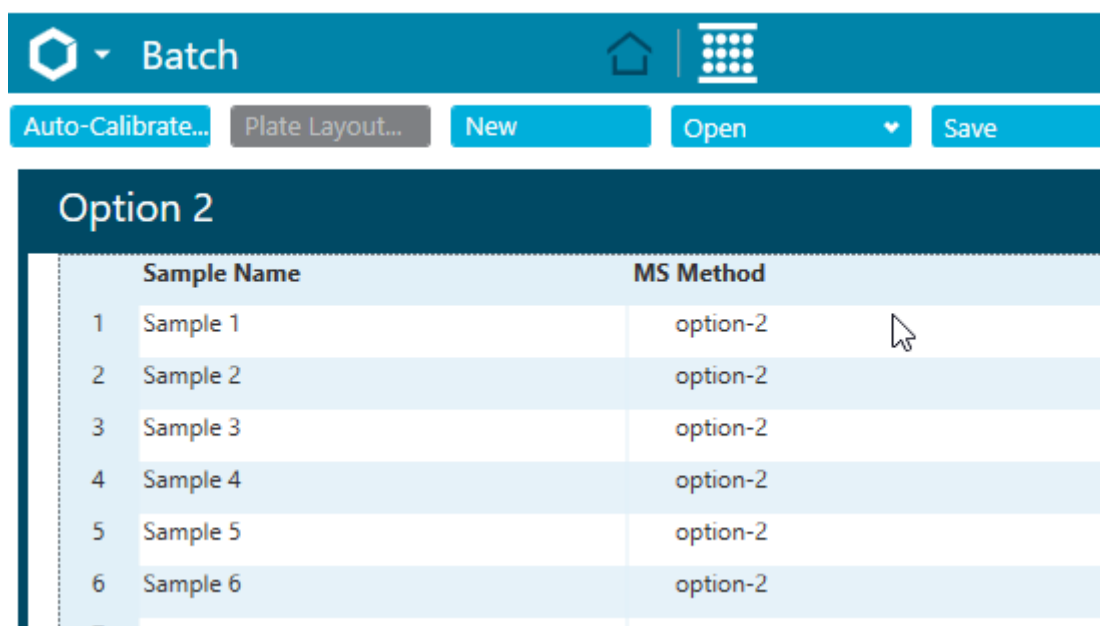



Figura B-4: Calibração CDS: exemplo de fila



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 2 - 8 samples				
⌚	3/9/2018 11:02:41 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:03:57 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:05:58 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:07:59 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:10:00 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:11:16 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:17 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:15:18 AM	Sample 6	option-1		option-1

Tabela B-2: Sequência de amostras no dispositivo externo

Tempo (mm:ss)	Injeção
00:00	Amostra 1
02:00	Amostra 2
04:00	Amostra 3
06:00	Branco
08:00	Amostra 4
10:00	Amostra 5
12:00	Amostra 6

## Calibração do sistema com o sistema de LC

Se o sistema estiver se comunicando com um dispositivo externo por meio de fechamento de contato, siga estas diretrizes para calibrar o sistema usando o dispositivo externo:

- Nas propriedades do espectrômetro de massas, configure uma válvula para simular o dispositivo externo.
- Crie um método de LC para a válvula.
- Certifique-se de que a duração do método seja inferior ou igual ao tempo entre as injeções no dispositivo externo.
- Configure as propriedades de autocalibração do lote: selecione a tabela de referência de íons e ajuste a frequência de calibração. Para os **Calibrant delivery**, selecione o método de LC da válvula e, para **MS method**, selecione o método de MS a ser utilizado.

## Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato

Figura B-5: Calibração de LC: Automatic Calibration Editor

Batch - Automatic Calibration Editor

Provide ion reference and calibrant delivery settings to be applied automatically, at the correct frequency during acquisition

Ion reference table: Beta Galactosidase Digests

Calibrate every: 3 samples

Calibrant delivery: valve-method

MS method: lc-calibration

Rack Type:

Rack Position:

Plate Type:

Plate Position:

Vial Position:

**Nota:** Certifique-se de inserir um tempo de retenção para cada peptídeo na tabela de referências.

- Envie o lote e inicie a fila. Certifique-se de que as entradas na fila correspondam às entradas na programação do dispositivo externo.
- Inicie a injeção no dispositivo externo.

Os exemplos a seguir mostram o lote e a fila no SCIEX OS e a programação correspondente no dispositivo externo de um lote em que a calibração é executada após cada terceira amostra. A duração do método de MS é de 1 minuto. A duração do método de calibração também é de 1 minuto.

Figura B-6: Calibração LC: Batch

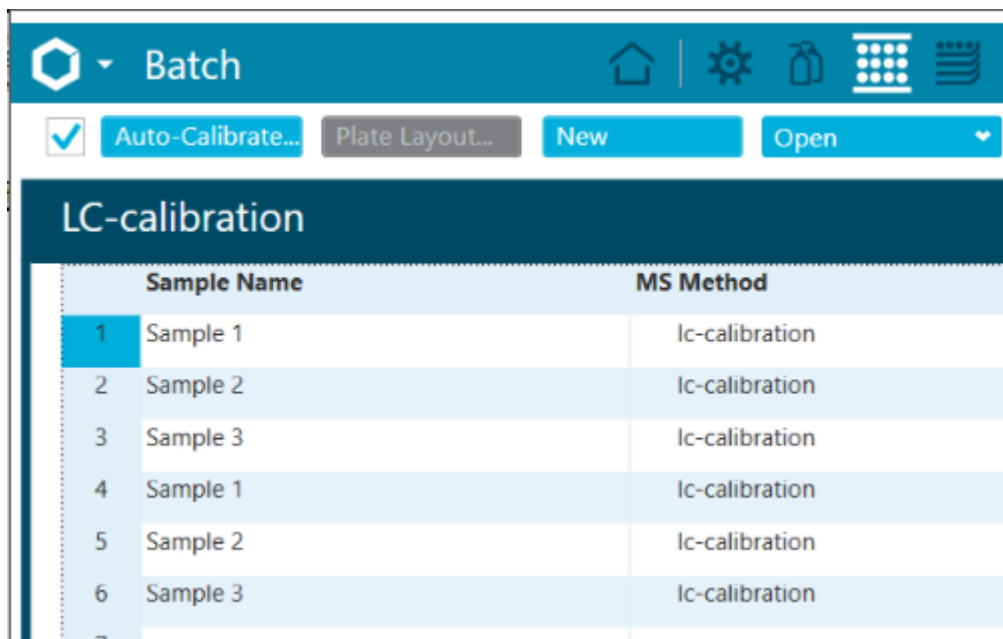


Figura B-7: Calibração LC: Queue

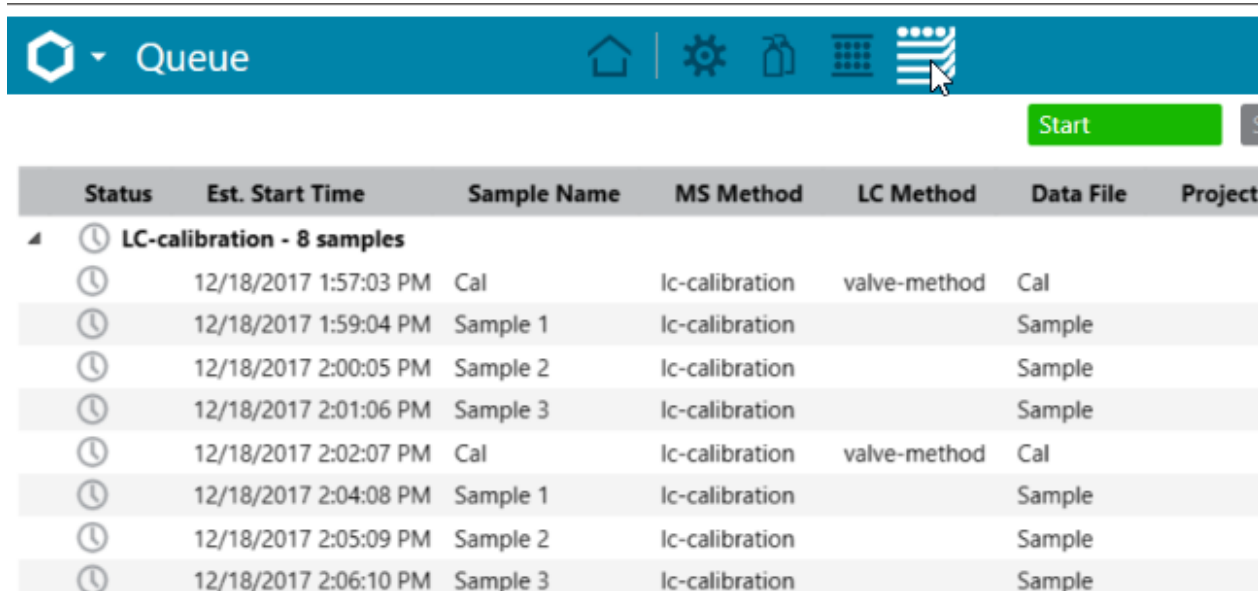


Tabela B-3: Sequência de amostras no dispositivo externo

Tempo (mm:ss)	Injeção
00:00	Calibrante
01:00	Amostra 1
02:00	Amostra 2

## Calibrar um sistema configurado com fechamento de contato

---

**Tabela B-3: Sequência de amostras no dispositivo externo (continuação)**

Tempo (mm:ss)	Injeção
03:00	Amostra 3
04:00	Calibrante
05:00	Amostra 1
06:00	Amostra 2
07:00	Amostra 3

## Calibração em modo manual

Esta seção descreve como usar o fechamento do contato para calibrar o sistema ao executar um método manualmente no espaço de trabalho do método de MS.

### Calibração do sistema com o CDS

1. No espaço de trabalho dos métodos de MS, abra o método a ser executado.
2. Clique em **Advanced > Calibrate**.
3. No campo **Ion Reference Table**, selecione **X500 Positive Calibration Solution** ou **X500 Negative Calibration Solution**, dependendo da polaridade do método.
4. Selecione **Apply Calibration**.
5. Clique em **OK**.
6. Clique em **Start**.

### Calibração do sistema usando um método de LC

Se o sistema estiver se comunicando com um dispositivo externo por meio de fechamento de contato, siga estas diretrizes para calibrar o sistema usando o dispositivo externo:

- Nas propriedades do espectrômetro de massas, configure uma válvula para simular o dispositivo externo.
  - Crie um método de LC que contenha uma válvula e tenha duração inferior ou igual à duração do método de MS.
1. No espaço de trabalho dos métodos de MS, abra o método de MS a ser executado.
  2. Clique em **Start with LC** e selecione o método de LC.
  3. Quando o status do sistema mudar para **Loading**, inicie a injeção no dispositivo de LC.

# Massas exatas e fórmulas químicas **C**

## Reserpina

**Tabela C-1: Massa exata do íon molecular e fragmentos da reserpina (C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>N<sub>2</sub>O<sub>9</sub>)**

Descrição	Massa
Íon molecular C <sub>33</sub> H <sub>41</sub> N <sub>2</sub> O <sub>9</sub>	609,28066
Fragmento C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> NO <sub>8</sub>	448,19659
Fragmento C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	397,21218
Fragmento C <sub>22</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	365,18597
Fragmento C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>3</sub>	236,12812
Fragmento C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	195,06519
Fragmento C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO	174,09134

## Peptídeo ALILTLVS

**Tabela C-2: Massa exata do peptídeo ALILTLVS**

Name	Sequência	Massa	Estado de carga
Íon precursor	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811.5288	1+
b7	ALILTLV	724.4967	1+
b7-18	ALILTLV	706.4862	1+
b6-18	ALILTLV	607.4178	1+
y5	LTLVS	532.3341	1+
b5	ALILT	512.3443	1+
b5-18	ALILT	494.3337	1+
b4	ALIL	411.2966	1+
b3	ALI	298.2125	1+
Fragmento interno y b	IL ou LI	227.1754	1+
Fragmento interno y b	LT ou TL	215,139	1+
b2	AL	185.1285	1+

## Massas exatas e fórmulas químicas

---

**Tabela C-2: Massa exata do peptídeo ALILTLVS (continuação)**

<b>Name</b>	<b>Sequência</b>	<b>Massa</b>	<b>Estado de carga</b>
a2	AL	157.1335	1+
Íons de imônio	I ou L	86.09643	1+



## Introdução

Esse documento fornece uma visão geral de tutorial de algumas das ferramentas e funcionalidades disponíveis no software. Ele não fornece uma descrição detalhada de cada operação disponível, mas explica alguns dos fluxos de trabalho mais comuns que o software pode realizar.

## Instituição

Enquanto algumas funções e operações são específicas a certas aplicações e fluxos de trabalho, a maioria é genérica e usada com frequência ao explorar dados qualitativos. Essa seção do documento fornece uma breve introdução aos conceitos do software e uma descrição de algumas das operações mais comuns e essenciais. As seções seguintes descrevem abordagens para fluxos de trabalho específicos e usam os arquivos de dados de amostra fornecidos com o software.

Os arquivos de amostra estão disponíveis em [sciex.com/software-support/software-downloads](http://sciex.com/software-support/software-downloads), em **SCIEX OS resources**. Copie todo o projeto para a pasta D:\SCIEX OS DATA no computador. Os arquivos de amostra a seguir são usados como exemplo neste tutorial:

- Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff
- Bromocrip\_IDA-DBS em plasma\_T=0.wiff
- Bromocrip\_IDA-DBS em plasma\_T=1.wiff
- DataSET61.wiff
- DataSET62.wiff
- DataSET63.wiff
- DataSET64.wiff
- DataSET65.wiff
- DataSET66.wiff
- RP\_digests.wiff
- RP\_Intact.wiff
- Bromocriptine.mol

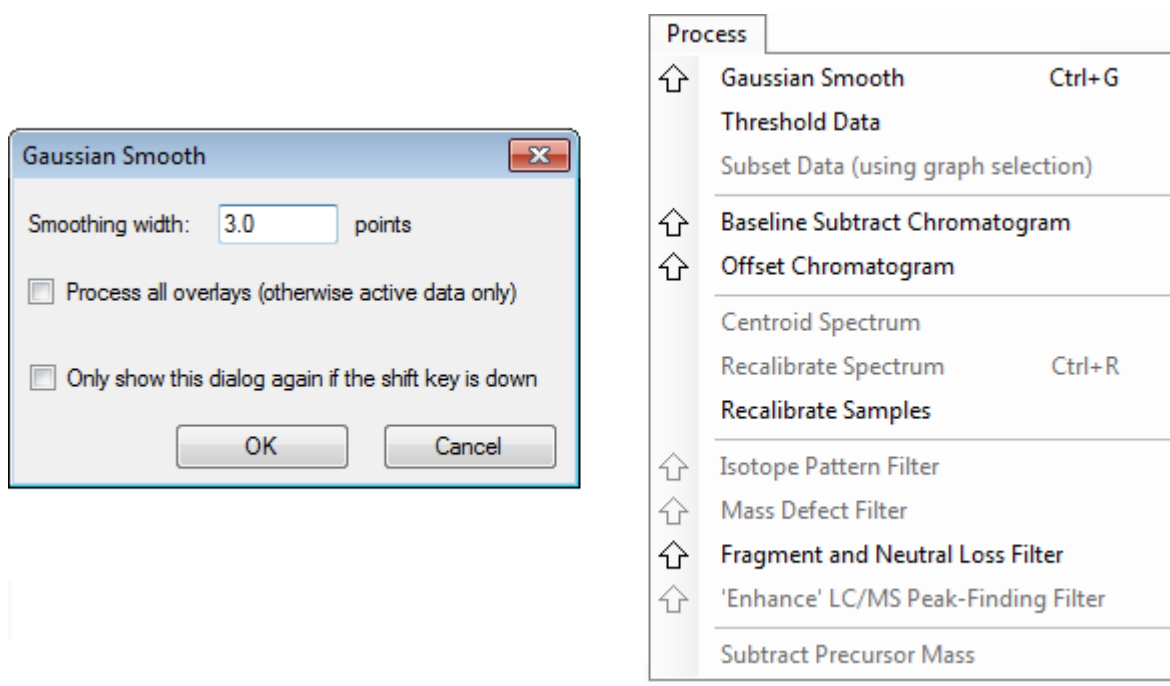
Os arquivos de bromocriptina são de análises IDA de modo negativo de uma incubação com microssomas de fígado de rato. Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff foi obtido do momento de uma hora, enquanto os outros dois são para os momentos de zero e de uma hora injetados no plasma. O arquivo Bromocriptine.mol contém a estrutura molecular da bromocriptina. DataSET61 até DataSET66 são arquivos coletados de loratadina e

suas impurezas. Os diferentes conjuntos de dados representam diferentes níveis de concentração. O arquivo RP\_Intact.wiff é de uma análise de mioglobina intacta. O arquivo RP\_digests.wiff é de uma análise de mioglobina tipicamente digerida.

## Opções

O software fornece várias opções para filtrar a forma como os comandos se comportam. Algumas, mostradas na [Figura D-1](#), fornecem uma caixa de verificação que permite que o diálogo seja mostrado somente se a tecla **Shift** estiver pressionada. Isso eliminará a necessidade de interagir com a caixa de diálogo se não forem necessárias alterações nos parâmetros. O menu para esses comandos contém uma seta apontando para cima.

**Figura D-1: Opções**



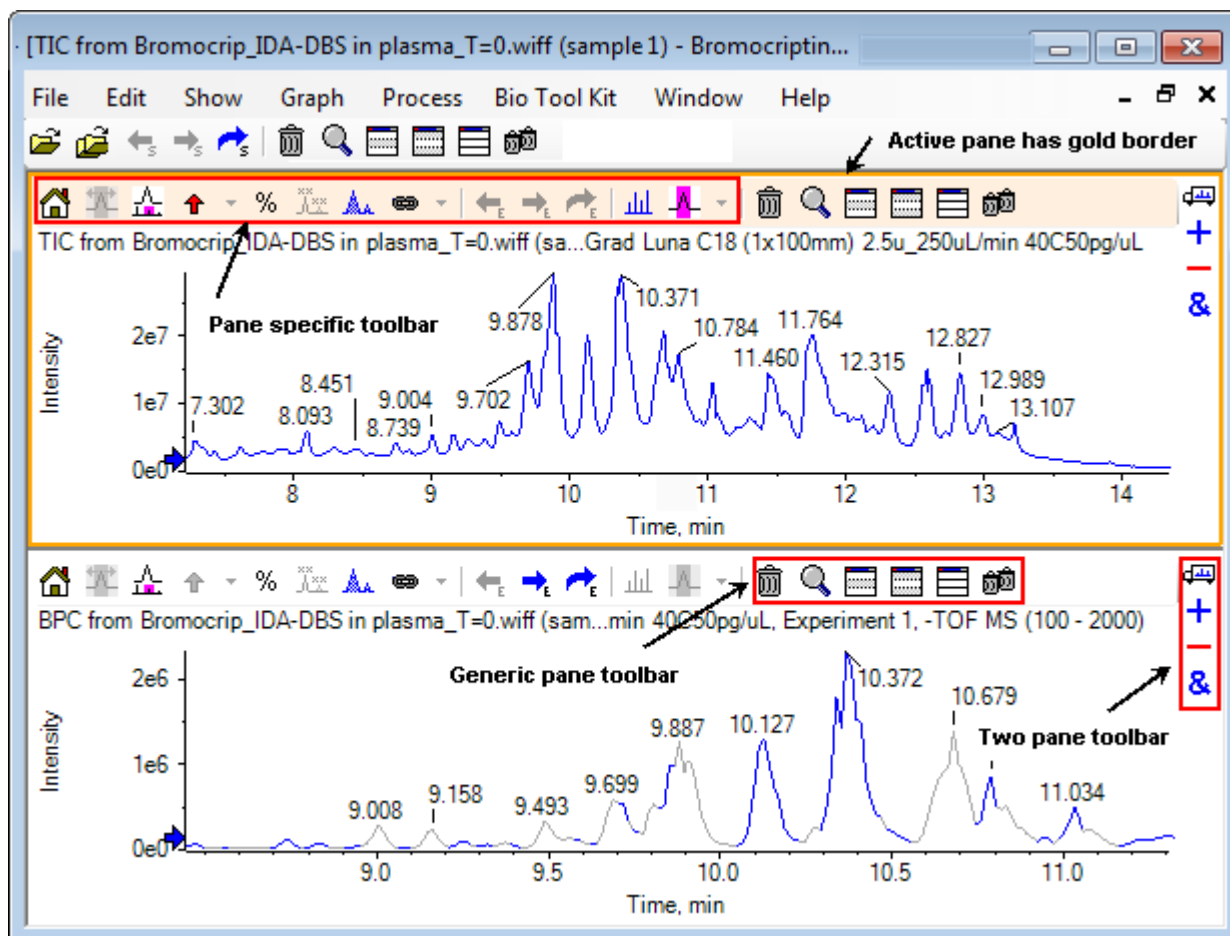
## Painéis

Enquanto o software usa janelas para expor e receber informações, o componente básico da interface do usuário é um painel. Uma janela pode conter um ou mais painéis, mas somente um painel por vez pode estar ativo. Os painéis recebem comandos de menus e barras de ferramentas. Os menus e as barras de ferramentas fornecem meios de manipular os painéis ou os dados contidos.

Os painéis podem conter gráficos como espectros e cromatogramas, mapas de calor ou tabelas, assim como visualizações mais específicas. Operações de processamento comuns criam painéis para mostrar informações ou trabalham nos dados mostrados dentro de um painel. Cada painel contém ferramentas genéricas de um e dois painéis. A maioria dos painéis tem ferramentas adicionais que são específicas ao tipo de painel. As ferramentas adicionais fornecem acesso aos comandos mais comuns.

Um exemplo de janela comum é mostrado na [Figura D-2](#). A janela contém dois painéis, com o painel ativo e o cromatograma, identificados pela borda colorida e pela barra de ferramentas.

**Figura D-2: Exemplo de painéis dentro de uma janela**






As operações comuns do painel estão resumidas em [Barra de ferramentas genéricas do painel](#) e [Barra de ferramentas de dois painéis](#). As operações específicas do painel são resumidas em [Gráficos](#).




### Barra de ferramentas genéricas do painel

Clique em um ícone para usar as operações genéricas do painel único.

**Tabela D-1: Ícones da barra de ferramentas genéricas do painel**

Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Excluir esse painel
	Expandir o painel ativo para preencher a janela
	Ocultar esse painel

**Tabela D-1: Ícones da barra de ferramentas genéricas do painel (continuação)**

Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Ocultar todos os outros painéis
	Mostrar todos os painéis ocultos atualmente
	Excluir todos os outros painéis (mantenha pressionada a tecla Ctrl para excluir somente os painéis depois deste)

---

**Nota:** Ícones semelhantes também estão disponíveis na barra de ferramentas principal, localizados abaixo da barra de menu. Clicar em um dos ícones na barra de ferramentas principal terá o mesmo efeito de clicar nos ícones do painel ativo. Esta barra de ferramentas poderá ser útil se o painel ativo tiver sido redimensionado e alguns dos ícones não estiverem visíveis.

---

### **Excluir esse painel**

Se houver vários painéis abertos, use esse ícone para excluir o painel correspondente. Se houver apenas um painel aberto, esse ícone não estará disponível.

### **Expandir o painel ativo para preencher a janela**

Use esse ícone para expandir o painel para preencher a janela inteira ou para retornar ao tamanho original do painel. Se a janela contiver diversos painéis, esse ícone permanecerá temporariamente sobre um deles.

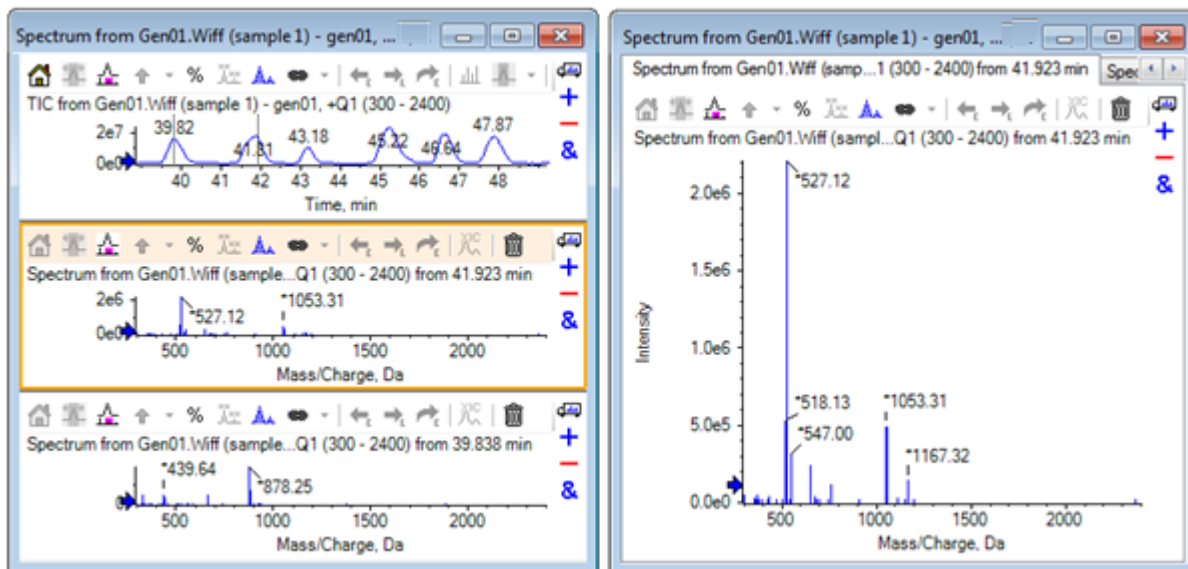
Uma aba separada é mostrada na parte superior da janela para cada painel. Clique na aba adequada para alternar entre os painéis

---

**Nota:** Se os títulos dos painéis forem longos, nem todas as guias serão visíveis. Use os botões de seta à direita das guias para rolar por elas. Clique no ícone novamente para retornar à visualização original, mostrando todos os painéis.

---

Figura D-3: Exemplo de painel expandido



### Ocultar esse painel

Use esse ícone para esconder o painel de forma que outros painéis na janela preencham o espaço disponível. Esse ícone é útil quando o usuário quer visualizar um subconjunto de painéis, mas não quer excluir permanentemente os outros painéis.

### Ocultar todos os outros painéis

Use esse ícone para ocultar todos os painéis, exceto o painel correspondente. O resultado é, de certa forma, semelhante ao clicar no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela**, porque, nos dois casos, somente o painel correspondente permanece e preenche o espaço disponível. A diferença é aparente quando outro painel é criado na sequência. No caso do painel expandido, esse novo painel se torna ativo e preenche o espaço disponível. No caso de painéis ocultos, os dois painéis (o painel ativo original e o novo) ficam visíveis.

### Mostrar todos os painéis ocultos atualmente

Use esse ícone para mostrar todos os painéis que foram ocultos.

### Excluir todos os outros painéis

Se a tecla Ctrl não estiver pressionada, esse ícone excluirá todos os painéis na janela, exceto o painel correspondente. Essa opção é útil para limpeza e reprocessamento da amostra. Qualquer painel atualmente oculto também é excluído.

Se a tecla Ctrl estiver pressionada, somente os painéis que estão depois do painel correspondente serão excluídos. Essa opção é útil quando há vários painéis abertos e somente alguns dos iniciais são necessários. Nesse caso, os painéis ocultos não são excluídos.

### Barra de ferramentas de dois painéis

Arraste o ícone para usar as operações de dois painéis (a disponibilidade depende do tipo de painel). O painel de origem é aquele que contém o ícone selecionado, e o segundo painel é o de destino.

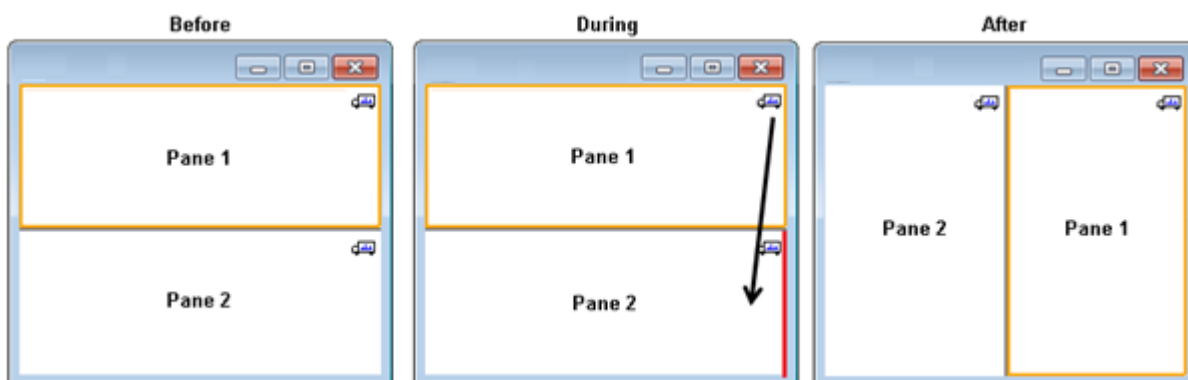
**Tabela D-2: Ícones da barra de ferramenta de dois painéis**

Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Arrastar e soltar para reorganizar os painéis.
	Arrastar para outro gráfico para incluir os dados ativos nos dados ativos do gráfico de destino (Mantenha pressionada a tecla Ctrl para adicionar os dados ativos a todos os conjuntos de dados no outro gráfico.)
	Arrastar para outro gráfico para subtrair os dados ativos dos dados ativos do gráfico de destino (Mantenha pressionada a tecla Ctrl para subtrair todos os conjuntos de dados do destino. Segure a tecla Shift para manter os valores negativos.)
	Arrastar para outro gráfico para sobrepor os dados ativos no gráfico de destino. (Mantenha pressionada a tecla Ctrl para sobrepor todos os conjuntos de dados, não apenas o ativo.)

#### Arrastar e soltar para reorganizar os painéis

Esse ícone é mostrado no canto superior direito de cada painel e é usado para alterar as posições relativas dos painéis. Clique no ícone em um painel e arraste-o para a parte superior, inferior, esquerda ou direita de um segundo painel. Dependendo de onde o ícone for liberado, o primeiro painel mudará a posição em relação ao segundo. Conforme o cursor é arrastado, um lado do segundo painel é realçado em vermelho para indicar onde o primeiro painel será colocado. A [Figura D-4](#) mostra o resultado de arrastar esse ícone do painel superior para a parte direita do painel inferior.

**Figura D-4: Resultado de arrastar o ícone do painel superior para a parte direita do painel inferior**



---

**Nota:** É possível arrastar os painéis de uma janela para outra.

---

### **Arrastar para outro gráfico para incluir os dados ativos nos dados ativos do gráfico de destino**

Use esse ícone para somar dois conjuntos de dados, ponto a ponto. Os dados de origem (do painel que foi clicado originalmente) são incluídos aos dados de destino (o painel sobre o qual o ícone é liberado). O título dos dados é atualizado para indicar que foi modificado.

---

**Nota:** É possível adicionar ao mesmo tempo somente dois conjuntos de dados do mesmo tipo. Por exemplo, um espectro não pode ser adicionado a um cromatograma.

---

**Nota:** Se o gráfico de destino contém mais de um traço sobreposto, então, por padrão, os dados de origem são incluídos somente aos dados de destino ativos. Se a tecla Ctrl estiver pressionada, a origem será incluída a todos os conjuntos de dados no destino.

---

### **Arrastar para outro gráfico para subtrair os dados ativos dos dados ativos do gráfico de destino**

Use esse ícone para subtrair os dados de origem dos dados de destino. Este ícone é útil para subtrair a linha de base de um espectro de massa.

---

**Nota:** Se o gráfico de destino contém mais de um traço sobreposto, então, por padrão, os dados de origem são subtraídos somente dos dados de destino ativos. Se a tecla Ctrl estiver pressionada, a origem será subtraída de todos os conjuntos de dados no destino.

---

**Dica!** Normalmente, quaisquer pontos de dados para os quais a intensidade na origem for maior que no destino não são mantidos. Isso significa que os valores negativos de y são descartados. Se a tecla Shift estiver pressionada, os pontos com intensidade negativa serão mantidos.

---

### **Arrastar para outro gráfico para sobrepor os dados ativos no gráfico de destino**

Use esse ícone para sobrepor os dados ativos do gráfico de origem ao gráfico de destino. Depois que a operação for concluída, o gráfico de destino conterá uma nova série com uma cópia dos dados de destino.

---

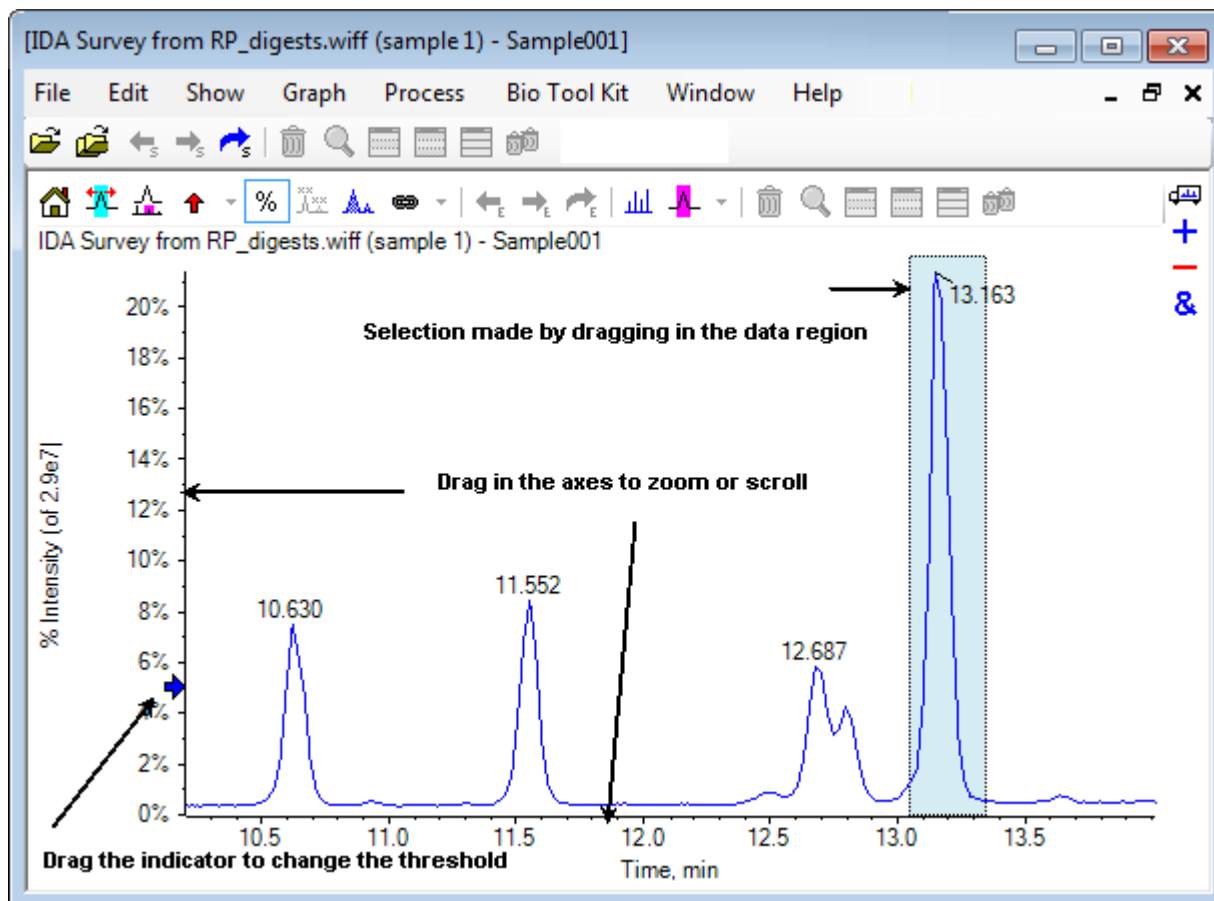
**Nota:** Se o gráfico de origem contiver mais de um traço sobreposto, então, por padrão, somente uma cópia de seus dados ativos será movida para o gráfico de destino. Se a tecla Ctrl for pressionada, uma cópia de todos os conjuntos de dados no gráfico de origem será sobreposta no gráfico de destino.

---

## **Gráficos**

Os gráficos são painéis que permitem visualização e interação de dados. Várias operações são comuns a todos os gráficos, enquanto outras dependem do tipo de dado mostrado.

Figura D-5: Gráficos



Os comandos genéricos são resumidos da seguinte forma:

- O zoom e a rolagem são realizados ao arrastar o cursor na região do eixo x ou y do gráfico. Clicar duas vezes reconfigura o eixo à faixa original e clicar no eixo enquanto pressiona a tecla **Shift** reverte o gráfico à visualização anterior (desfaz o zoom e a rolagem).
- Um indicador de limite pode ser posicionado ao arrastá-lo. O limite geralmente determina quais picos são rotulados e, às vezes, é usado para determinar quais picos são processados.
- As seleções são feitas arrastando a região de dados. As seleções são usadas para definir uma parte dos dados a serem usados ou processados. Selecione várias regiões pressionando a tecla **Shift** enquanto arrasta. Pressione a tecla **Ctrl** para fazer seleções no eixo x e no y.

## Barra de ferramentas específicas do gráfico

Tabela D-3: Ícones da barra de ferramentas específicas














Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Retornar o gráfico com zoom para a visualização inicial



Tabela D-3: Ícones da barra gráfica de ferramentas específicas (continuação)

Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Selecionar zoom para visualização completa
	Mostrar gráfico de "zoom" (para rastrear o zoom atual). Consulte a <a href="#">Figura D-6</a> .
	Incluir setas marcadoras para picos selecionados
	Usar o eixo y com valor em porcentagem
	Rotular todos os traços sobrepostos
	Preencher os picos
	Vincular o eixo x do gráfico a outros (com as mesmas unidades) na janela (Segure a tecla Control para aplicar a todos os gráficos atuais)
	Alterar os dados para usar no experimento anterior
	Alterar os dados para usar no próximo experimento
	Alterar os dados para usar um experimento selecionado
	Exibir um espectro para seleção
	Configurar o intervalo de subtração do ruído de fundo

**Nota:** Os últimos seis ícones nessa barra de ferramentas, começando com o ícone Excluir esse painel, estão descritos em [Barra de ferramentas genéricas do painel](#).

### Retornar o gráfico com zoom para a visualização inicial

Se o gráfico estiver com zoom, então use esse ícone para retornar à visualização inicial, ou seja, à tela na qual tanto o eixo x quanto o eixo y mostram suas faixas predefinidas e todos os dados disponíveis estão visíveis. Clicar duas vezes no eixo x retorna o gráfico à visualização inicial. Clicar duas vezes no eixo y retorna somente esse eixo à sua faixa completa.

### Selecionar zoom para visualização completa

Use esse ícone para dar zoom no gráfico para que a região selecionada preencha inteiramente o espaço disponível. Antes de selecionar esse ícone, clique e arraste o cursor para fazer uma seleção. Você também pode aumentar o zoom arrastando diretamente no eixo X (ou Y) do gráfico.

### Mostrar gráfico de "zoom" (para rastrear o zoom atual)

Use esse ícone para mostrar uma pequena cópia do gráfico abaixo do gráfico principal conforme mostrado na [Figura D-6](#). Esse gráfico de visão panorâmica sempre mostra a faixa total disponível e indica região de zoom do gráfico principal selecionado com uma marcação

## Tutorial do Explorer

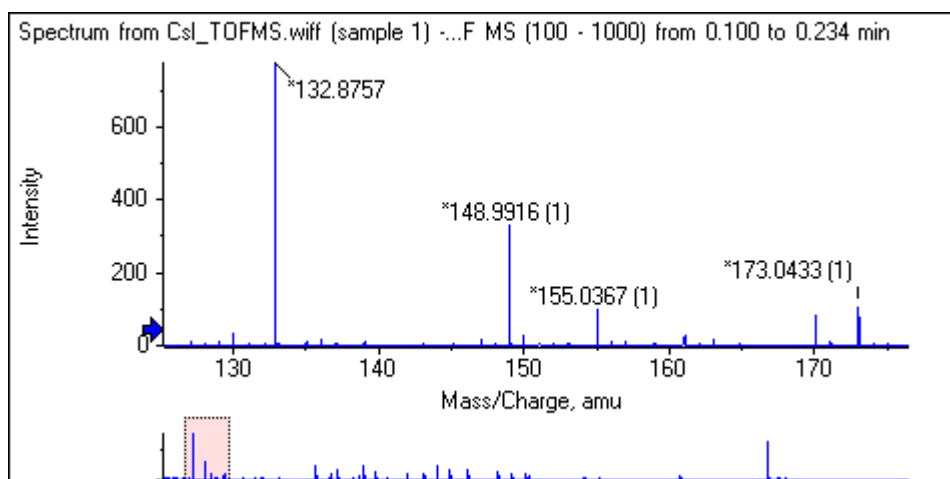
---

de cor rosa. Como o gráfico principal está ampliado, esta seleção será atualizada na mesma proporção.

Se a seleção de pico for arrastada para um novo local, o gráfico principal será deslocado, conforme necessário. Arrastar a seleção perto da extremidade esquerda ou direita da seleção ajustará sua largura. Nesse caso, o gráfico principal aumenta, conforme necessário.

Essa funcionalidade é útil para espectro de massas de alta resolução, porque geralmente é necessário ampliar muito o gráfico para ver os detalhes desejados. O gráfico de visão geral ainda permite ao usuário rastrear onde a região ampliada está localizada, com referência à faixa de massas inteira.

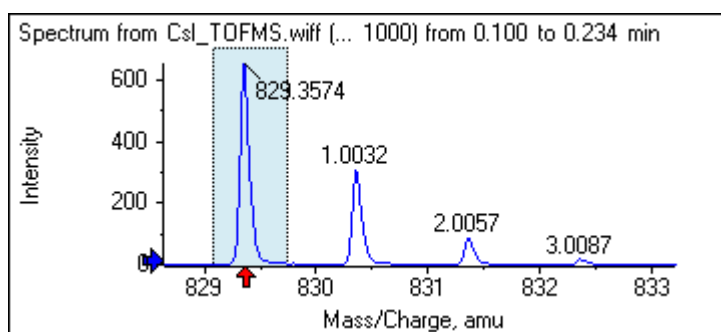
**Figura D-6: Mostrando o gráfico de visão geral**



### Incluir setas marcadoras para picos selecionados

Use esse ícone para incluir um marcador de seta ao maior pico dentro da região selecionada no gráfico. A [Figura D-7](#) mostra o resultado de clicar nesse ícone quando o pico 829 (aproximadamente) estiver selecionado como mostrado.

**Figura D-7: Incluindo marcador de seta única**

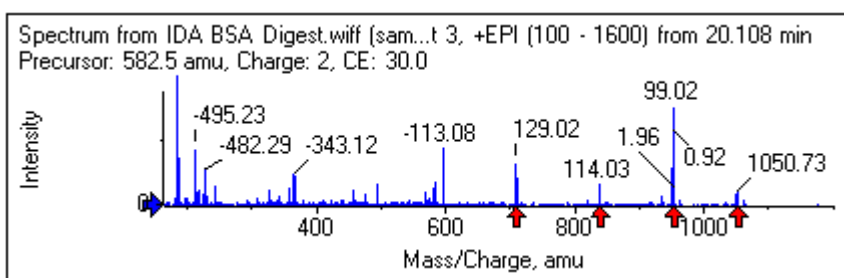


As setas agem como pontos de referência nos dados. Por padrão, os picos que não estão próximos de uma seta são rotulados com a distância da seta mais próxima. O pico próximo da seta com o maior valor de X é rotulado com seu valor real de X. Os picos próximos a outras setas, diferentes da última, são rotulados com relação à seta com o valor mais alto de

x. Na [Figura D-7](#), o pico em aproximadamente 829 Da é rotulado com seu valor em  $m/z$  real e os picos do isótopo são rotulados com suas distâncias desse pico. Os picos à esquerda da seta (não mostrados) teriam valores rotulados negativos.

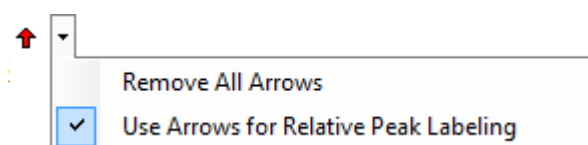
As setas geralmente são usadas em espectros de massas e fornecem uma forma conveniente de buscar diferenças de massa esperadas, como isótopos, perdas neutras em espectros MS/MS e assim por diante. A [Figura D-8](#) mostra um espectro MS/MS de um peptídeo no qual as setas foram incluídas a valores correspondentes a perdas neutras de resíduos de aminoácidos. Por exemplo, o pico rotulado 99,02 pode ser uma perda de valina do pico em 1050,73 Da, o próximo rotulado 114,03 pode ser uma perda adicional de asparagina, e assim por diante. O pico rotulado -113,08 pode ser uma perda de leucina ou isoleucina do pico rotulado 129,02 (com valor real de  $m/z$  próximo de 709 Da).

**Figura D-8: Incluindo várias setas marcadoras**



Se essa rotulação relativa de pico não for utilizada, desmarque o item no menu **Use Arrows for Relative Peak Labeling** que aparece na [Figura D-9](#). Nesse caso, as setas serão usadas para marcar os picos de interesse particular.

**Figura D-9: Menu Add Arrow Marker**



Os usuários podem arrastar uma seta para um novo local. Se ela for arrastada para a área do gráfico, isso cancelará a operação de arraste. Se o usuário arrastar a seta para fora do gráfico, a seta será excluída. É possível excluir todas as setas, selecionando **Remove All Arrows** do menu mostrado na [Figura D-9](#).

### Usar o eixo Y com valor em porcentagem

Esse ícone modifica a escala absoluta do eixo y em porcentagem. Quando selecionado, os traços sobrepostos são escalados para que o valor máximo para cada traço esteja a 100%. Usar o eixo y com valores percentuais é conveniente se as magnitudes absolutas dos traços sobrepostos forem muito diferentes.

### Rotular todos os traços sobrepostos

Por padrão, quando vários traços são sobrepostos, somente o traço ativo é rotulado. Clique nesse ícone para rotular todos os traços. Clique no ícone novamente para remover todos os rótulos e depois voltar à visualização original.

### Preencher os picos

Clique nesse ícone para preencher os picos para os dados ativos, usando preenchimentos alternados entre escuros e claros. Este recurso é útil para visualizar o início e o término exatos dos picos. Clique no ícone novamente para remover todo o preenchimento e voltar à visualização original.

### Vincular o eixo X do gráfico a outros (com as mesmas unidades) na janela

Os eixos de dois ou mais gráficos podem ser vinculados a um eixo de um gráfico ampliado para se ajustarem automaticamente ao mesmo. Este recurso pode ser útil para comparar os dados nesses gráficos. Uma alternativa é sobrepor os conjuntos de dados no mesmo gráfico. No entanto, nem sempre isso é desejado.

Clique no ícone **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** em cada um dos gráficos a serem vinculados. Se a tecla **Ctrl** for pressionada enquanto se clica no ícone, todos os gráficos atuais com as mesmas unidades do eixo X e na mesma janela do gráfico ativo serão vinculados. Por exemplo, se três espectros estiverem visíveis e **Ctrl** + o ícone **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** for clicado em um deles, os três espectros serão vinculados um ao outro.

---

**Nota:** Nesse exemplo, se um novo espectro for gerado posteriormente, ele não é vinculado aos outros. Para vincular o novo espectro, clique no ícone **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** associado.

---

Por padrão, somente o eixo x dos gráficos são vinculados. Nesse caso, quando um gráfico for ampliado manualmente, os outros automaticamente serão ajustados no eixo y para que os picos dentro da visualização preencham o espaço disponível.

Para desvincular um gráfico vinculado, clique no ícone **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** no gráfico adequado. Pressionar a tecla **Ctrl** enquanto faz isso desvinculará todos os gráficos com as mesmas unidades do eixo x na mesma janela.

### Alterar os dados para usar no próximo experimento

Se os dados ativos para o gráfico estiverem associados a um experimento específico diferente do último, esse ícone substituirá os dados por dados do mesmo tipo, mas para o próximo experimento.

Por exemplo, se o TIC para o experimento 2 estiver ativo, clique nesse ícone para alternar para o TIC do experimento 3. Se um espectro de um determinado tempo estiver ativo para o experimento 2, clique nesse ícone para alternar para um espectro do mesmo tempo para o experimento 3.

### Alterar os dados para usar no experimento anterior

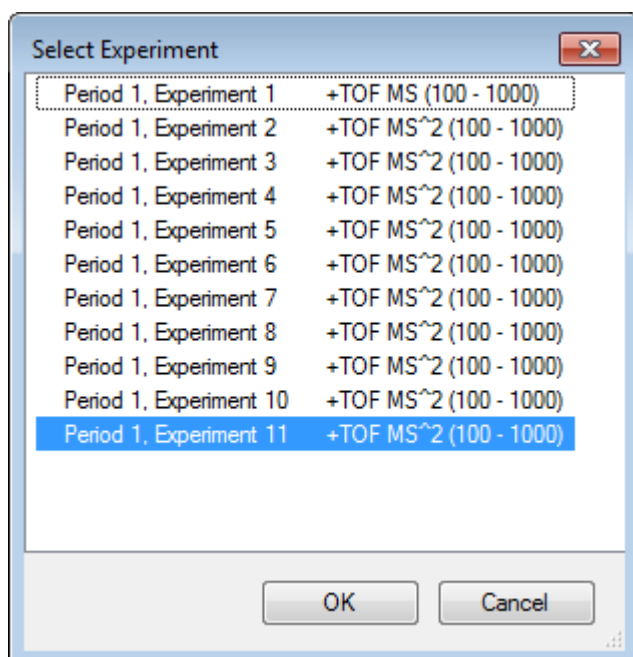
Se os dados ativos para o gráfico estiverem associados a um experimento específico diferente do primeiro, esse ícone substituirá os dados por dados do mesmo tipo, mas para o experimento anterior.

Por exemplo, se o TIC para o experimento 3 estiver ativo, clique nesse ícone para alternar para o TIC do experimento 2. Se um espectro de um determinado tempo estiver ativo para o experimento 3, clique nesse ícone para alternar para um espectro do mesmo tempo para o experimento 2.

### Alterar os dados para usar um experimento selecionado

Use este ícone para selecionar um experimento específico em vez de passar por todos individualmente. Clique no ícone para abrir uma caixa de diálogo que lista todos os experimentos disponíveis. A amostra ativa é destacada. Clique em um experimento na lista para selecioná-lo e depois clique em **OK**. Consulte a [Figura D-10](#).

**Figura D-10: Caixa de diálogo Select Experiment**



### Exibir um espectro para seleção


Use esse ícone para gerar um espectro de massas médio sobre o intervalo de tempo da seleção atual no gráfico. O mesmo resultado pode ser alcançado clicando duas vezes dentro da seleção.

### Configurar o intervalo de subtração do ruído de fundo

Use esse ícone para executar a subtração automática do ruído de fundo para espectros gerados a partir do cromatograma.

## Barra de ferramentas específicas do espectro

Tabela D-4: Ícones da barra de ferramentas específicas do espectro

Ícone	Nome (dica de ferramenta)
	Exibir um XIC para a seleção

---

**Nota:** Os primeiros onze ícones nessa barra de ferramentas, começando com o ícone Retornar o gráfico com zoom para a visualização inicial, estão descritos em [Barra de ferramentas específicas do gráfico](#).

---

**Nota:** Os últimos seis ícones nessa barra de ferramentas, começando com o ícone Excluir esse painel, estão descritos em [Barra de ferramentas genéricas do painel](#).

---

### Exibir um XIC para seleção

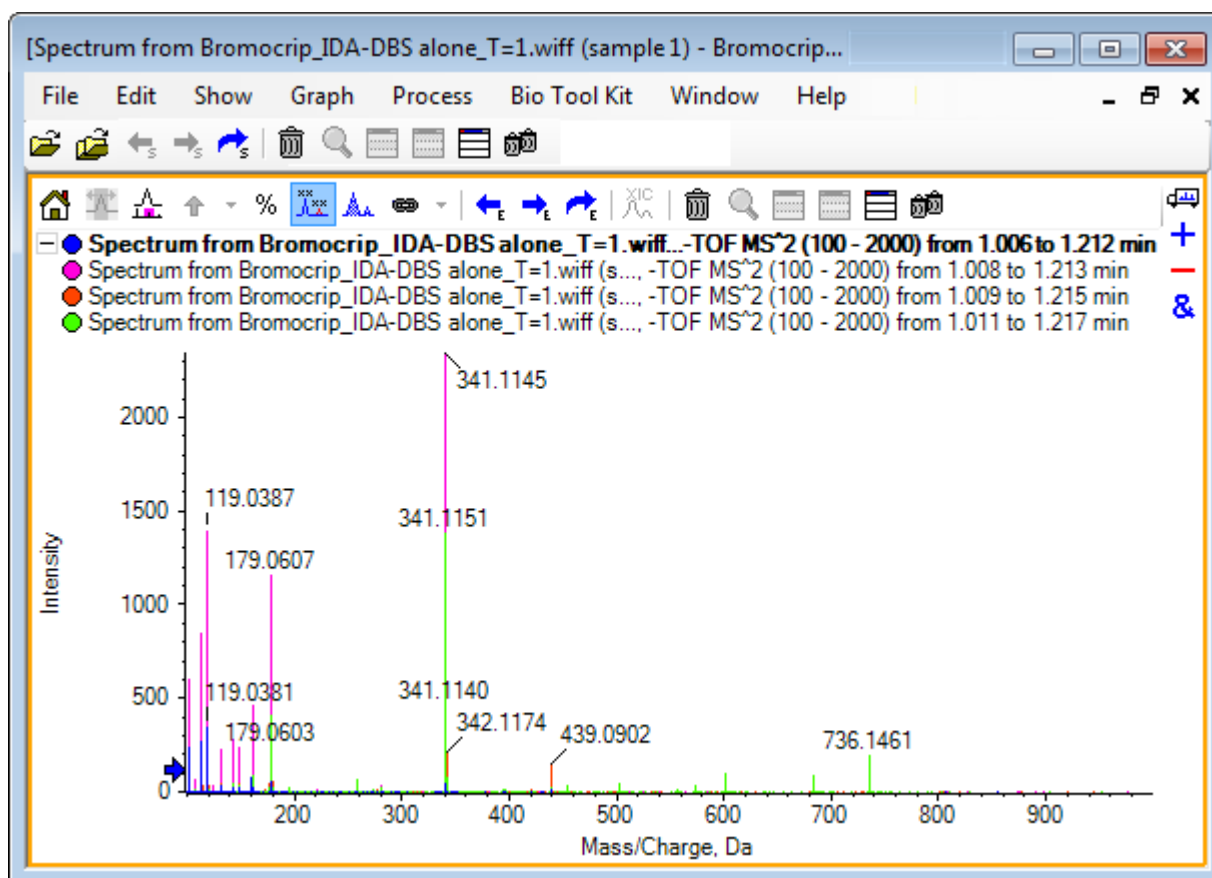
Use esse ícone para gerar um cromatograma de íon extraído (XIC) somada ao longo da faixa de massas da seleção atual no gráfico.

## Sobreposições

Os gráficos podem conter diferentes traços sobrepostos que compartilham os mesmos eixos para que possam ser facilmente comparados. Eles podem ser gerados arrastando o ícone de dois painéis (o ícone **Arrastar para outro gráfico para sobrepor os dados ativos no gráfico de destino**) e são produzidos automaticamente por alguns comandos de criação de painel. Consulte a [Cromatogramas e espectros](#).

Na [Figura D-11](#), o gráfico contém quatro espectros com o ícone **Rotular todos os traços sobrepostos** selecionado. A região do cabeçalho do gráfico mostra os títulos para os quatro espectros e círculos coloridos indicando a cor do traço. O traço ativo é mostrado em negrito. O traço em negrito será a base para qualquer operação de processamento, como limite da linha de base, alisamento do espectro, entre outros, e normalmente será o único a ser rotulado. Clicar no ícone à esquerda do título fará com que somente o título do traço ativo seja mostrado. Este recurso é útil quando existem muitas sobreposições. Clique no ícone novamente para reverter o processo. Se existem vários traços e o cursor for movido sobre os títulos, o cursor mudará para uma seta de duas pontas e agirá como uma barra de rolagem quando arrastado para que todos os títulos possam ser acessados.

Figura D-11: Gráfico contendo quatro espectros com o ícone Rotular todos os traços sobrepostos selecionado



Existem várias formas de alternar o traço ativo:

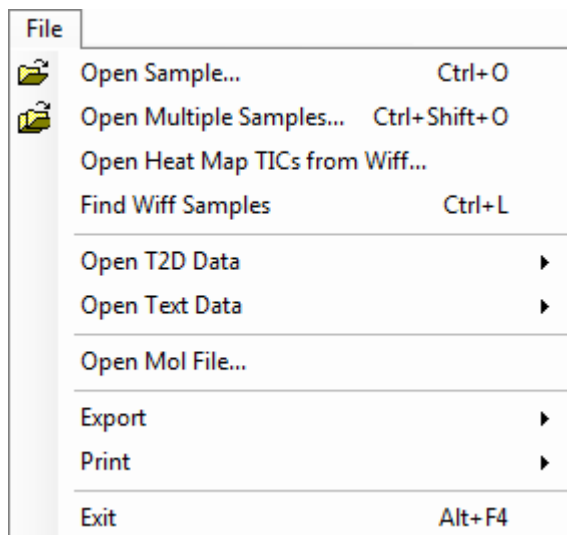
- Clique no círculo colorido ao lado do título
- Clique no próprio título
- Clique em um ponto de dados no traço (não no próprio traço)

Clicar com o botão direito em um gráfico com sobreposições mostrará um menu contendo comandos que podem ser usados para editar visualmente os traços mostrados. As opções **Remove Active Trace** e **Remove All Traces Except Active** serão mostradas.

## Abrir arquivos

Conforme mostrado na [Figura D-12](#), o software pode abrir diferentes tipos de arquivos de dados e possui comandos para abrir uma ou várias amostras.

**Figura D-12: Menu de arquivos**

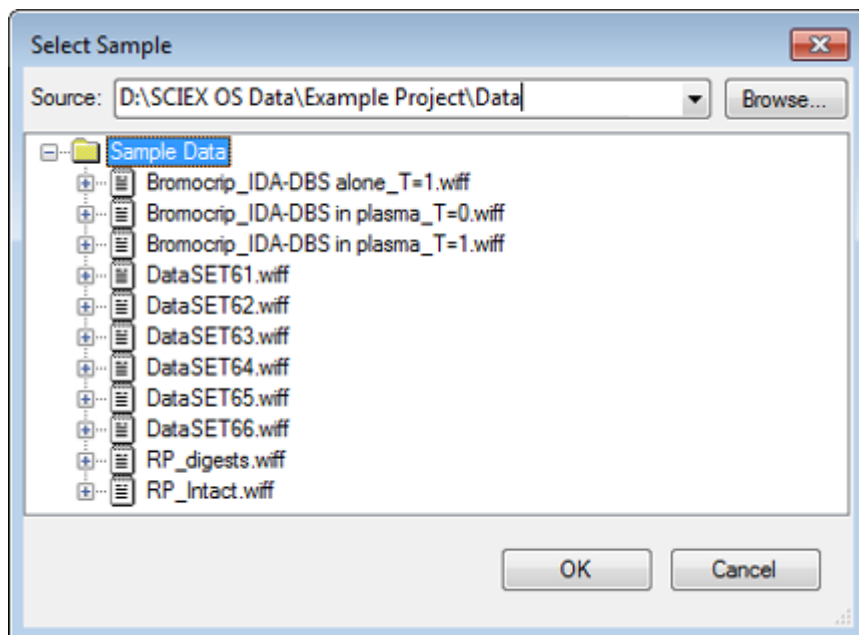


### Abrir arquivo de amostra única

A opção **Open Sample** abre a caixa de diálogo **Select Sample**. Consulte a [Figura D-13](#).

Essa caixa de diálogo permite que um único arquivo seja selecionado. A visualização resultante depende do comando selecionado, com um único arquivo .scan mostrando um espectro ou um Cromatograma de íons totais (TIC), e arquivos de várias varreduras .wiff mostrando o TIC (a soma de todos os experimentos se houver mais de um).

**Figura D-13: Caixa de diálogo Select Sample**





Clique no ícone à esquerda do arquivo .wiff para mostrar todas as amostras dentro do arquivo e depois selecione o nome do arquivo desejado. Se houver apenas uma amostra dentro do arquivo, selecione o nome do arquivo e clique em **OK**.

### Abrir arquivos de várias amostras

As opções **Open Multiple Samples** e **Open Heat Map TICs from Wiff** abrem a caixa de diálogo **Select Samples**. Consulte a [Figura D-14](#).

O painel esquerdo corresponde à caixa de diálogo **Open** que permite que as pastas sejam navegadas e os arquivos sejam especificados, e o painel direito indica os arquivos que serão abertos quando **OK** for clicado. As amostras podem ser transferidas da esquerda para a direita, como a seguir:

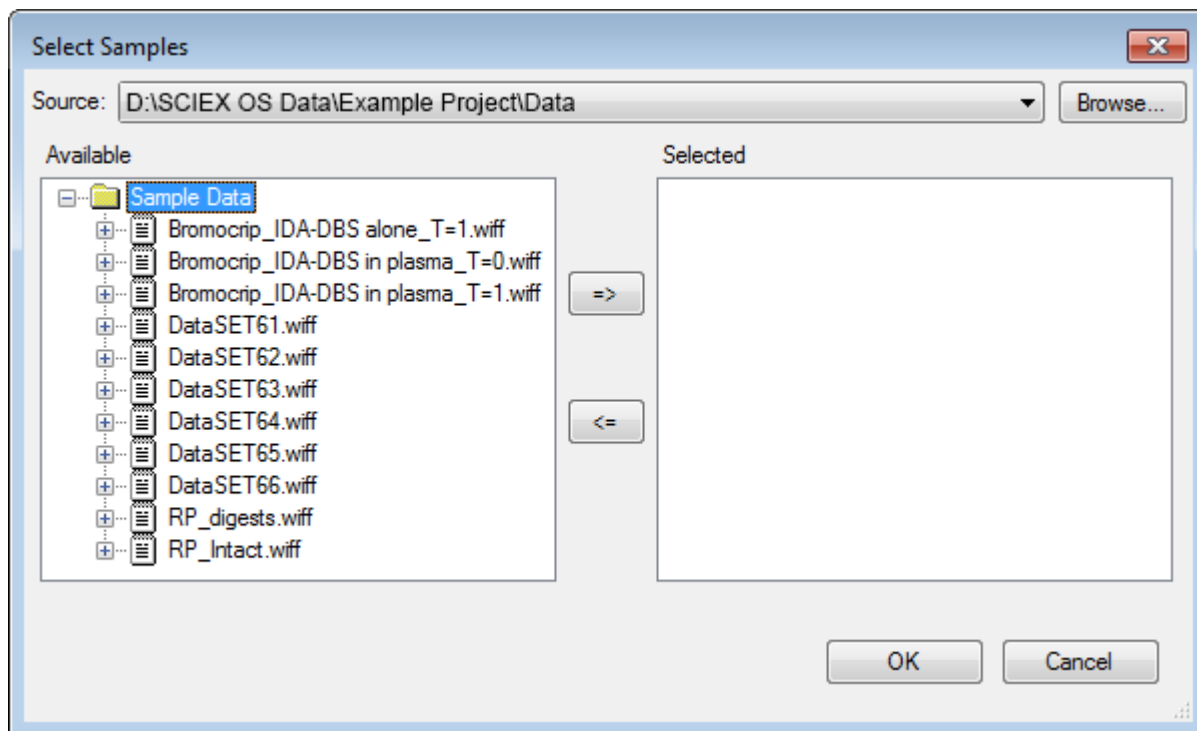
- Expanda o arquivo wiff, selecione a amostra e clique na seta apontando para a direita.
- Expanda o arquivo wiff, selecione a amostra e depois arraste-a para o painel direito.
- Expanda o arquivo wiff e depois dê dois cliques na amostra.

Se o arquivo contiver várias amostras, todas elas poderão ser transferidas selecionando o arquivo wiff e clicando na seta apontando para a direita ou selecionando o arquivo .wiff e arrastando-o para o painel direito.

As amostras podem ser transferidas da direita para a esquerda, como a seguir:

- Expanda o arquivo wiff, selecione a amostra e depois clique na seta apontando para a esquerda.
- Expanda o arquivo wiff, selecione a amostra e depois arraste-a para o painel esquerdo.
- Clique duas vezes na amostra.

Figura D-14: Caixa de diálogo Select Samples



## Cromatogramas e espectros

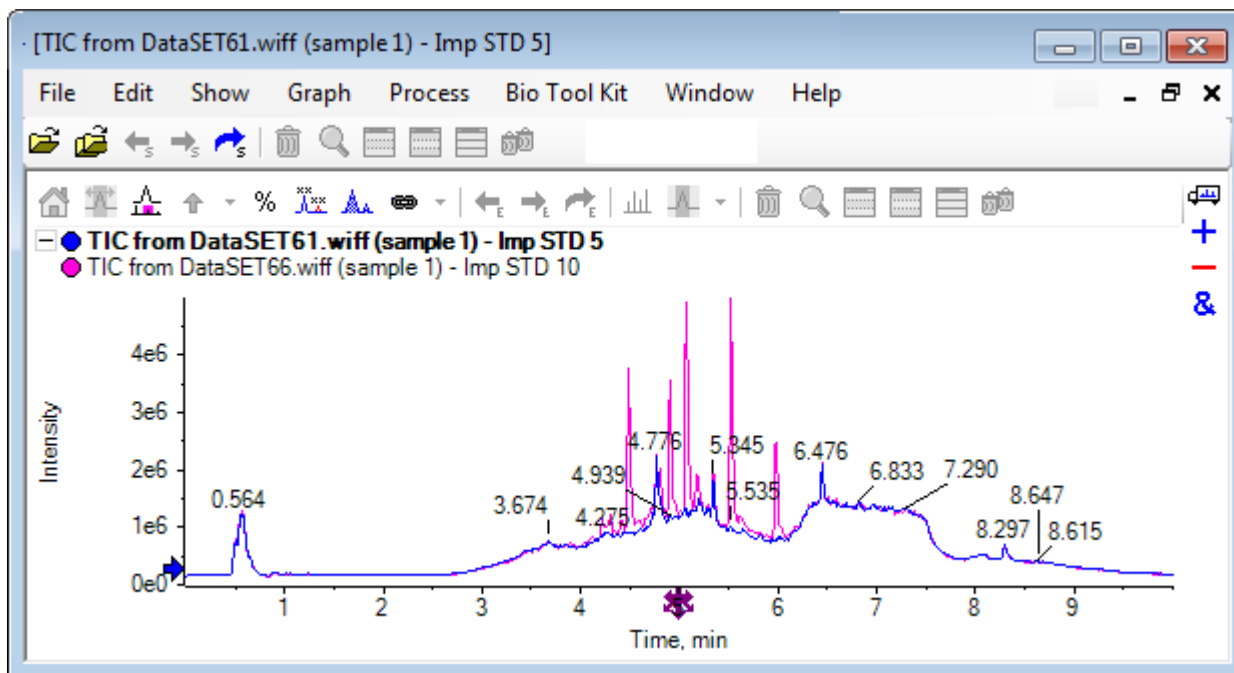
O Cromatograma de íons totais (TIC), espectros e o Cromatograma de íon extraído (XIC) são as visualizações de dados mais utilizadas ao explorar e revisar dados. O software fornece vínculos entre essas visualizações de dados para que os usuários possam gerar espectros rapidamente e depois XICs, para determinar se os picos nos espectros são de um ou mais picos cromatográficos.

### Cromatograma de íons totais (TIC)

Essa é a visualização padrão mostrada quando um arquivo wiff de uma varredura ou várias varreduras é aberto. O TIC mostrado corresponde a um cromatograma gerado pela soma das intensidades de todos os íons em cada espectro e depois demonstrando em gráfico a soma como uma função do tempo de retenção.

Se a amostra foi adquirida usando experimentos em loop, então, o TIC mostrado corresponderá às somas de intensidades de ambos os experimentos e uma seta especial indicadora aparecerá no eixo X. Consulte a [Figura D-15](#). Se clicar duas vezes no indicador, será mostrado um novo painel, mostrando TICs individuais sobrepostos para cada experimento.

Figura D-15: TIC



Se a amostra contiver dados IDA, selecione a opção IDA Explorer, que é uma forma gráfica de mostrar a massa e os tempos de retenção dos íons precursores selecionados, ou opte por selecionar um TIC convencional. Se a opção de TIC estiver selecionada, então os TICs separados serão mostrados para a pesquisa e para a soma dependente de IDA.

Veja o TIC a qualquer momento clicando em **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** para abrir uma caixa de diálogo que permite a seleção de qualquer experimento. Caso selecione o Período 1 mostrará o TIC para todos os experimentos, enquanto as outras entradas corresponderam aos TICs individuais. Use **Shift+** ou **Ctrl+** para selecionar mais de um experimento.

## Espectros

Se um arquivo contiver um único espectro, ele será mostrado quando for aberto.

Para dados com muitas varreduras, ao clicar duas vezes no cromatograma, ou no ícone **Exibir um espectro para seleção** aparecerá o espectro derivado ao tempo de retenção selecionado. Arraste o retângulo de seleção no cromatograma para atualizar o espectro e mostrar uma região.

Selecione várias regiões pressionando a tecla **Shift** depois de concluir a primeira seleção. Clique duas vezes em qualquer uma dessas seleções ou clique no ícone **Exibir um espectro para seleção** para gerar um novo painel de espectro com os espectros sobrepostos.

Para IDA, é aberta uma solicitação para sobrepor todos os espectros dependentes ou somente mostrar o primeiro espectro. No último caso, use as setas de direita e esquerda do teclado para mostrar os outros espectros.

## Tutorial do Explorer

---

**Nota:** Essa caixa de diálogo possui uma caixa de marcação Only show again if the shift key is down.

---

Gere espectros com ruídos de fundo subtraídos de duas formas:

- Gere espectros separados para as regiões de pico e linha de base e depois arraste o ícone de dois painéis de subtração do espectro de ruído de fundo para o espectro do pico.
- Defina uma região de ruído de fundo fazendo uma ou duas seleções no cromatograma e depois clicando no ícone **Configurar faixa de subtração do ruído de fundo**. Qualquer espectro gerado quando uma região de ruído é definida é subtraído automaticamente. A região de ruído de fundo é mostrada no cromatograma como um retângulo de seleção de cor vermelho claro e tanto ela, quanto as seleções do espectro, podem ser movidas para alterar os dados mostrados. Quando uma região de ruído de ruído é definida, ela pode ser removida clicando na seta próxima ao ícone e depois selecionando **Clear Subtraction Range**.

---

**Nota:** As setas de marcação são úteis no espectro, porque os rótulos do pico podem ser relativos ao pico mais próximo marcado com uma seta, que fornece uma maneira rápida de determinar as perdas de massa ou adutos. Se houverem várias sobreposições e o ícone Rotular todos os traços sobrepostos for selecionado, então, cada sobreposição será rotulada com relação à seta.

---

## Cromatograma de Íon Extraído (XIC)

Os XICs podem ser gerados de duas formas:

- Clicando em **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)**.

Essa ação abre uma caixa de diálogo em que as massas de início e fim ou valores de centro e largura podem ser digitados, dependendo do modo. Isso pode ser alterado no menu, aberto ao clicar com o botão direito dentro da caixa de diálogo. O menu também fornece acesso a outros comandos úteis, como a configuração de uma largura padrão e importação ou exportação da lista de massas. Os usuários também podem definir valores de massa, para que sejam usados automaticamente até serem removidos.

- Fazendo uma ou mais seleções em um espectro e depois clicar duas vezes em um deles ou clicando no ícone **Exibir um XIC para seleção**.

Essas ações geram um XIC correspondente a cada seleção. Por padrão, o programa determina o maior pico em cada faixa de seleção e configura automaticamente o XIC à partir dos valores de massa mínimo e máximo, obtidos a meia altura do pico.. Se a tecla **Ctrl** estiver pressionada, a largura da seleção inteira será usada.

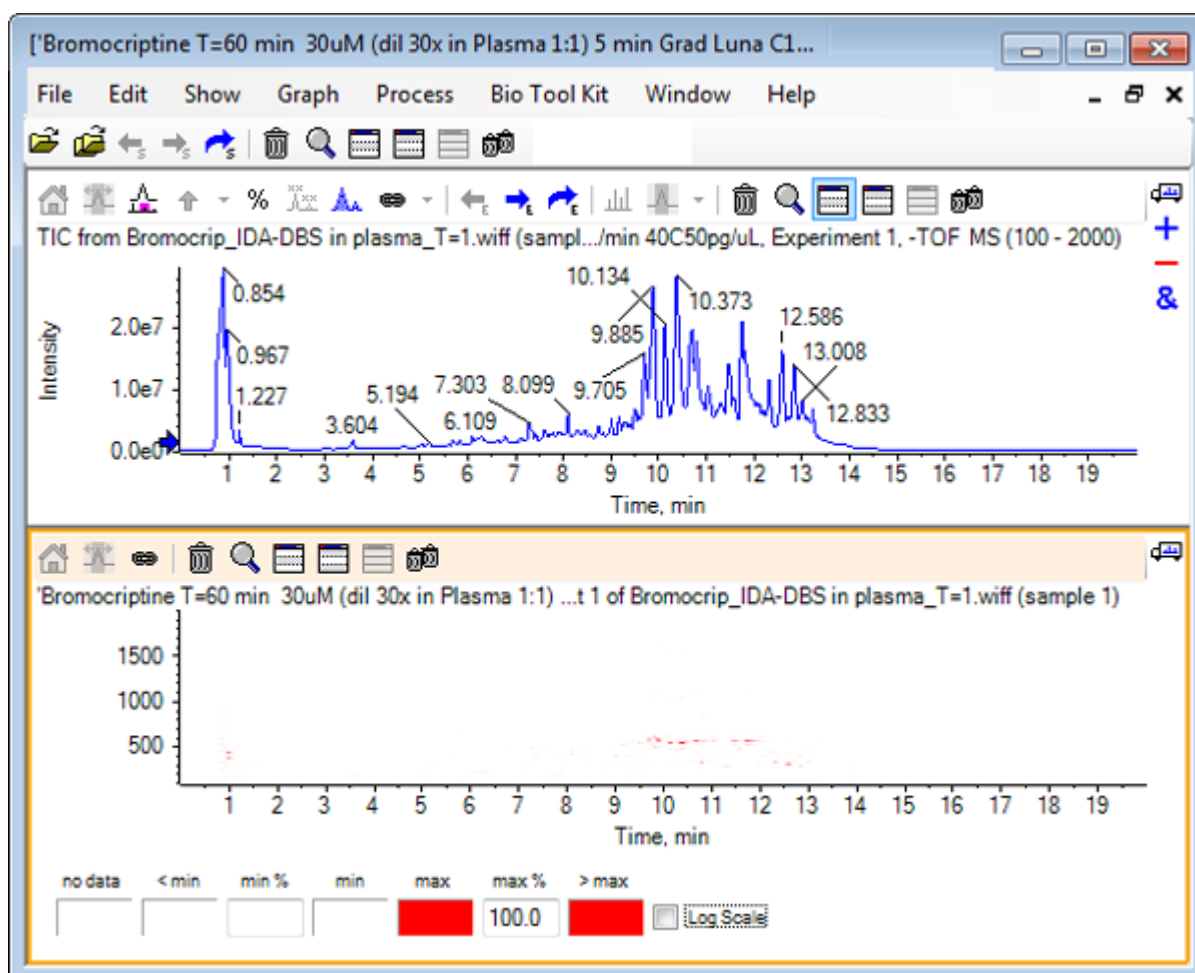
Em ambos os casos, é mostrado um gráfico contendo uma sobreposição para cada seleção. As seleções tornam-se. Arrastar os vínculos atualiza os XICs.

**Nota:** Os XICs normalmente são calculados e mostrados para toda a faixa cromatográfica, que pode ficar lenta, especialmente se houver várias seleções e os dados forem de um instrumento de alta resolução e contiver muitas varreduras. Um recurso útil é limitar as faixas de XIC para uma janela menor ao redor do tempo de retenção do espectro usado para gerá-las. Isso pode ser configurado na aba do XIC da caixa de diálogo mostrada depois de clicar em **Edit > Options > XIC**.

## Gráficos de contorno e mapas de calor

Um gráfico de contorno LC/MS (**Show > LC/MS Contour Pane**) mostra todos os dados de uma amostra LC/MS em um único painel. O exemplo na [Figura D-16](#) mostra um TIC e o mapa de contorno correspondente, que mostra os dados como um mapa da  $m/z$  versus o tempo de retenção com a intensidade codificada por cor. Nesse caso, os controles de cor também são mostrados, mas eles podem ser escondidos clicando com o botão direito na visualização e desmarcando a opção **Show Appearance Controls**. Como os gráficos de contorno e cromatogramas possuem o mesmo eixo x, eles podem ser vinculados juntos para que o zoom e a rolagem afetem as duas visualizações de forma semelhante, para fins comparativos.

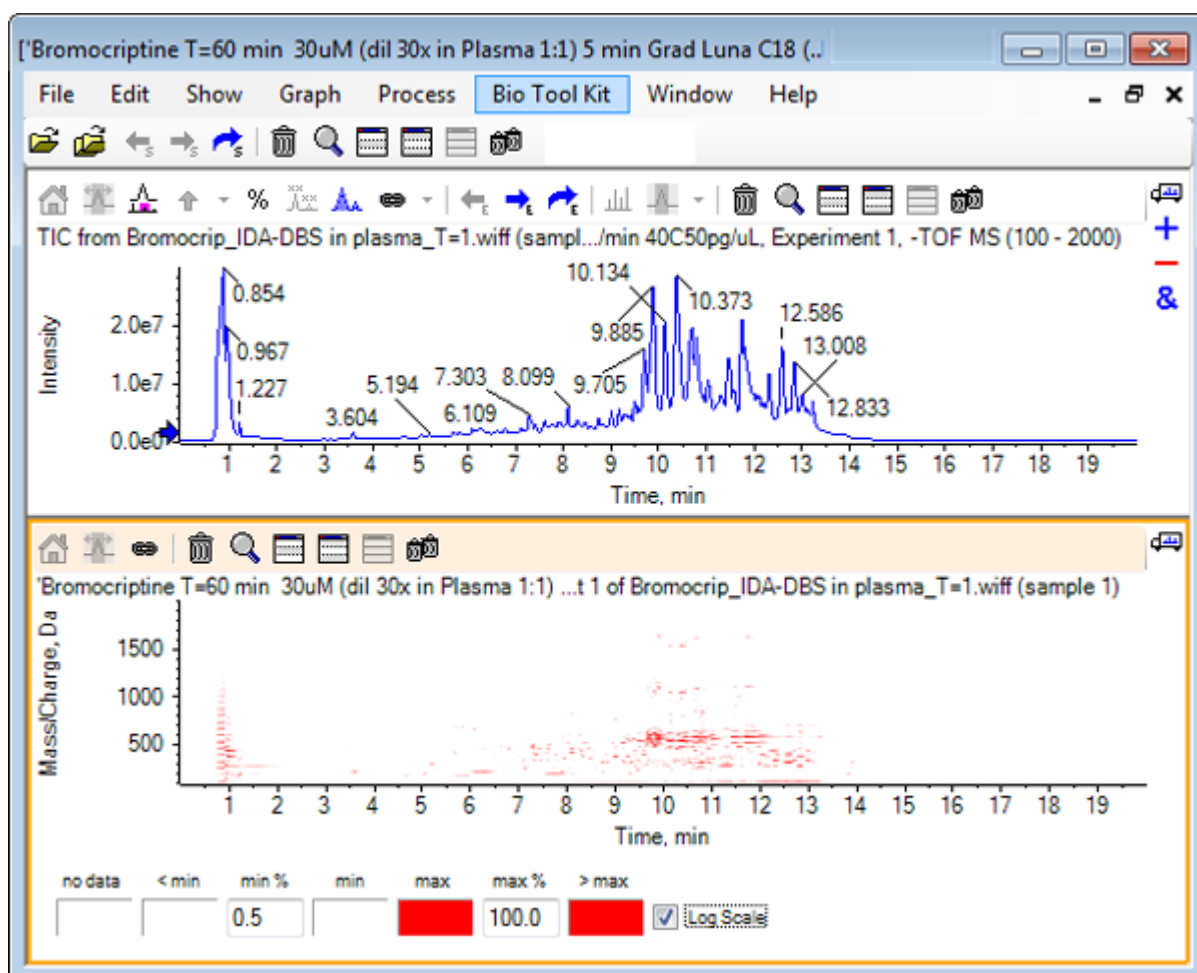
**Figura D-16: TIC e mapa de contorno correspondente**



## Tutorial do Explorer

O controle de cor usa uma paleta de 256 cores para mostrar intensidades na faixa definida por % **mín.** e % **máx.** As intensidades abaixo da % **mín.** são representadas usando < **mín.** e as intensidades acima da % **máx.** são representadas usando > **máx.** Se as cores usadas para < **mín.** e nenhum dado forem as mesmas (como aqui), então qualquer ponto de dados abaixo da % **mín.** desaparecem. Essa é uma forma de limite visual que pode simplificar o gráfico, conforme mostrado na [Figure 1-11](#), em que o valor de % **mín.** foi aumentado em 0,5%. Para mais informações sobre os controles de cor, consulte o *Guia do usuário do sistema*.

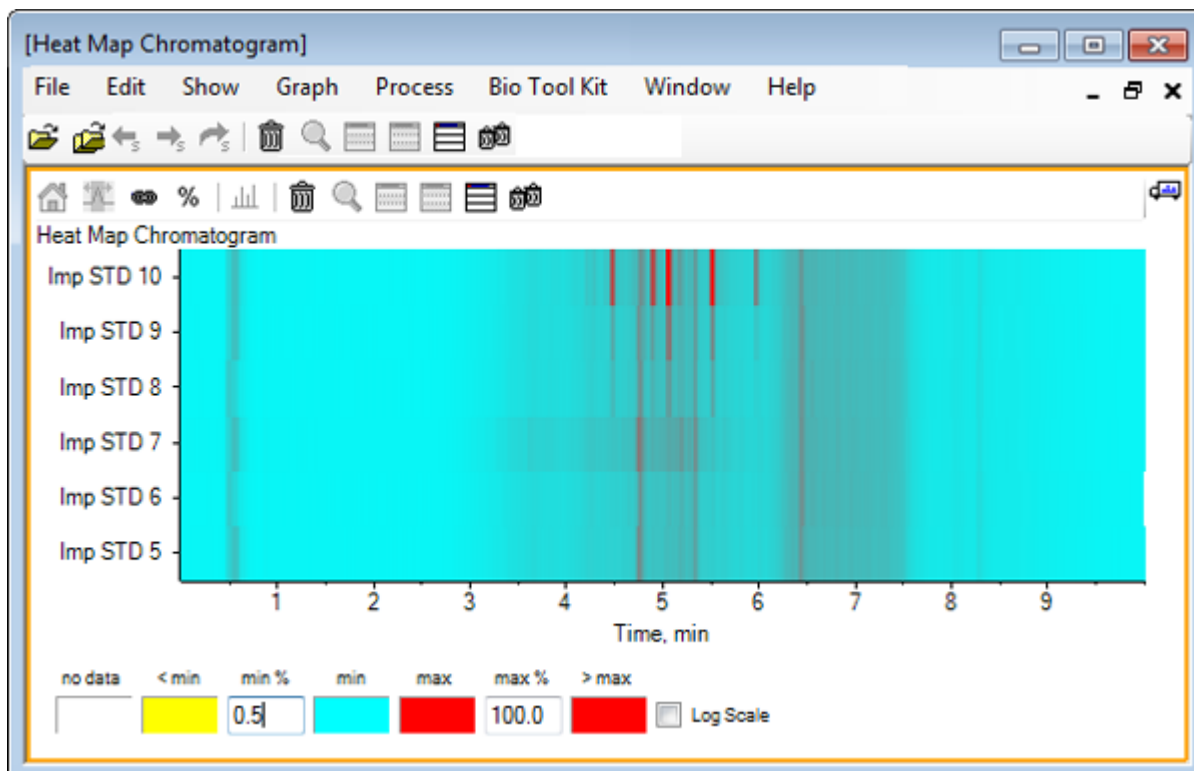
**Figura D-17: Mapa de contorno com valor da % mín. aumentado em 0,5%**



Picos de baixa intensidade pode ser evidenciados ao reduzir a % **máx.** para que a paleta de cores abranja uma menor faixa de intensidade, mas todos os picos maiores que esse valor possuem a mesma cor. Isso também pode ser enfatizado selecionando a opção **Log Scale**. Ativar a **Log Scale** requer um valor diferente de zero da % **mín.** (por exemplo, 1 ou 0,1) e, então, mapeia as cores para o logaritmo da intensidade percentual.

As ferramentas de visualização de várias amostras no software incluem a capacidade de mostrar TICs, XICs e espectros de várias amostras como séries de mapas de calor individuais, que podem ajudar na comparação delas. A [Figura D-18](#) é para uma série de cromatogramas TOF de seis analitos. Consulte a [Trabalhar com várias amostras](#).

Figura D-18: Cromatograma de mapa de calor



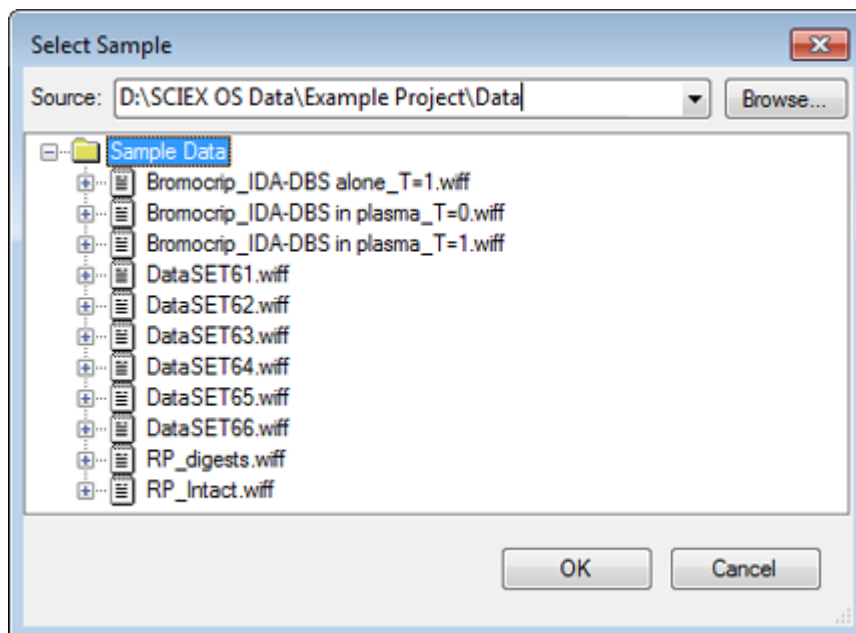
## Trabalhar com cromatogramas e espectros

Essa seção descreve algumas das opções de processamento mais comuns. O arquivo usado é um arquivo IDA com vários experimentos em loop, mas nesse exemplo, é usado o primeiro experimento da análise, simulando uma análise simples de LC/MS. Na seção seguinte, a funcionalidade do IDA é explorada.

### Abrir um arquivo de dados

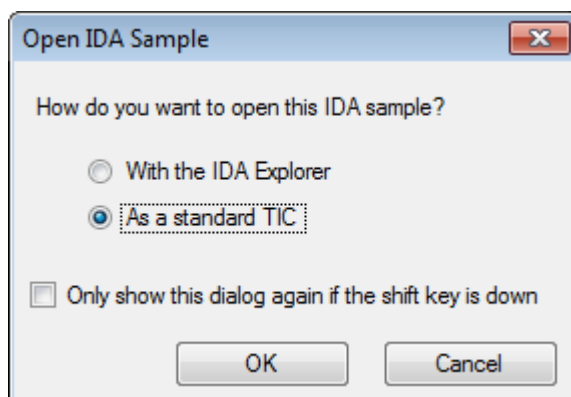
1. Clique no ícone **Abrir amostra** na barra de ferramentas principal. A caixa de diálogo **Select Sample** se abre.

**Figura D-19: Caixa de diálogo Select Sample**



2. Se a pasta **Sample Data** não estiver selecionada, clique em **Browse** e navegue até a pasta **Sample Data**. Para mais informações sobre os locais de arquivos de dados instalados, consulte [Instituição](#).
3. Para mostrar todas as amostras no arquivo, clique no ícone à esquerda do arquivo **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff**. Há apenas uma amostra no arquivo **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff**.
4. Selecione o nome da amostra e depois clique em **OK**. Como esse é um arquivo IDA, o software solicita que você especifique como abrir a amostra selecionada.

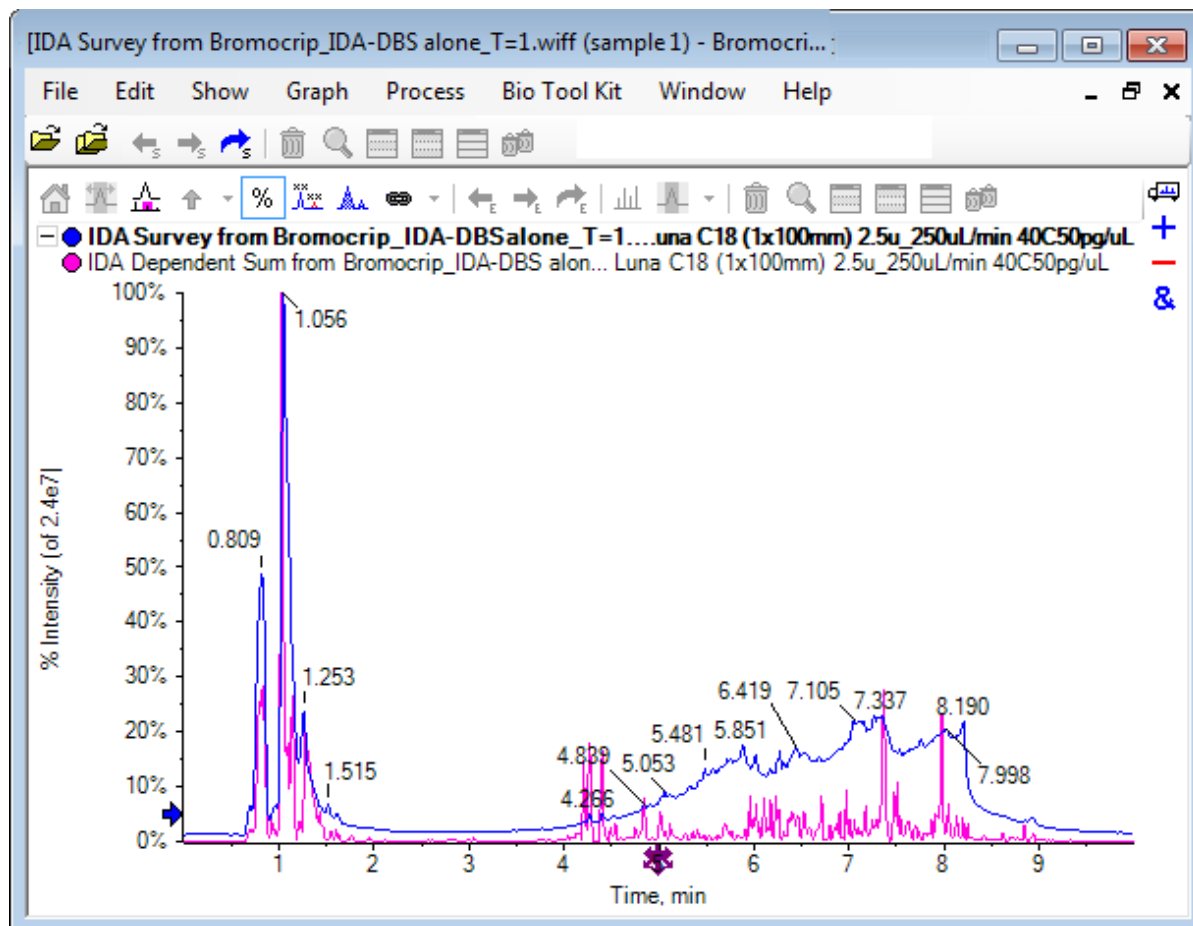
**Figura D-20: Abrir amostra IDA**



5. Clique em **As a standard TIC**, se ainda não estiver selecionado, depois clique em **OK** para gerar o TIC mostrado na [Figura D-21](#).



Figura D-21: TIC



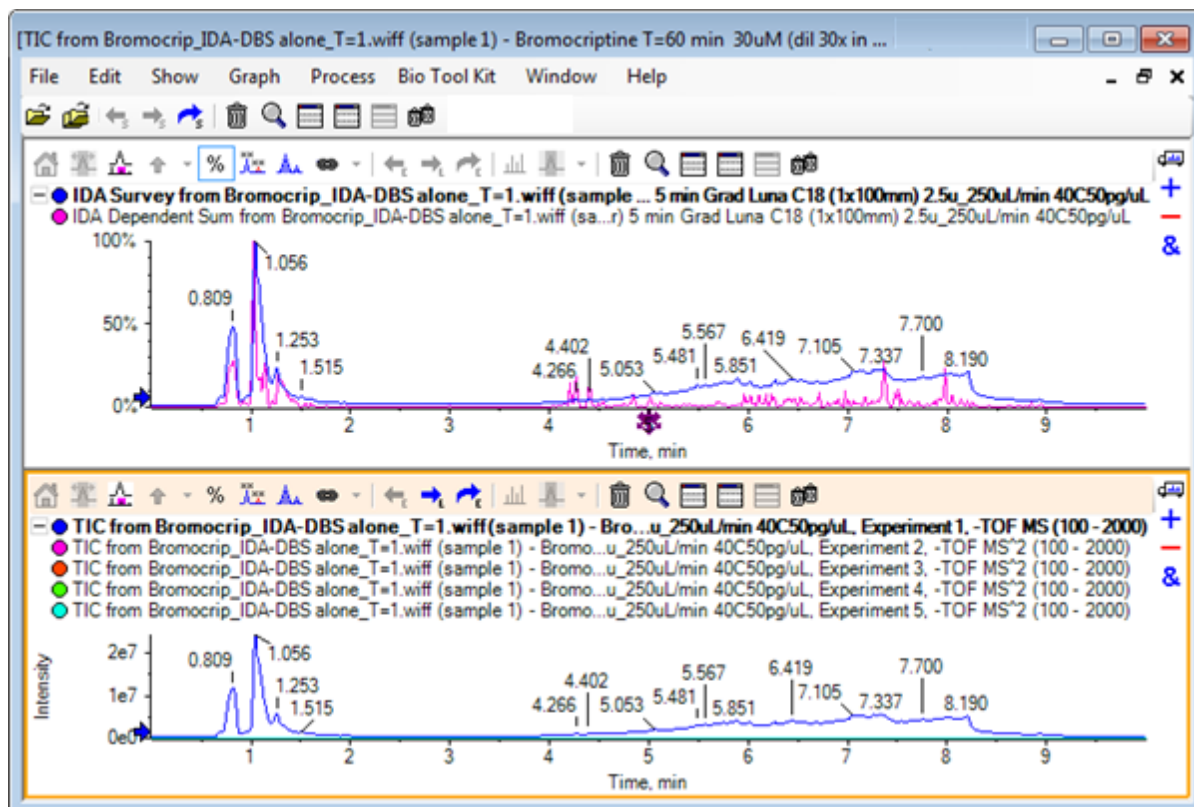
O painel possui uma sobreposição para o TIC de varredura da análise (azul) e outra para as varreduras dependentes da soma (ion produto). Nesse caso, nós queremos processar os dados da análise para mostrar apenas o TIC de análise.

## Mostrar o TIC para um experimento

1. Clique duas vezes no ícone **Clicar duas vezes para sobrepor TICs individuais para todos os experimentos** no centro do eixo x para gerar TICs sobrepostos para todos os experimentos.

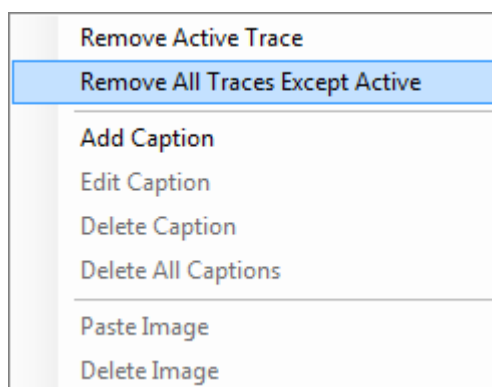
O novo cromatograma é o painel ativo. Além disso, como a análise é o primeiro experimento, ela é o traço ativo conforme indicado pelo título em negrito no cabeçalho.

Figura D-22: TICs sobrepostos



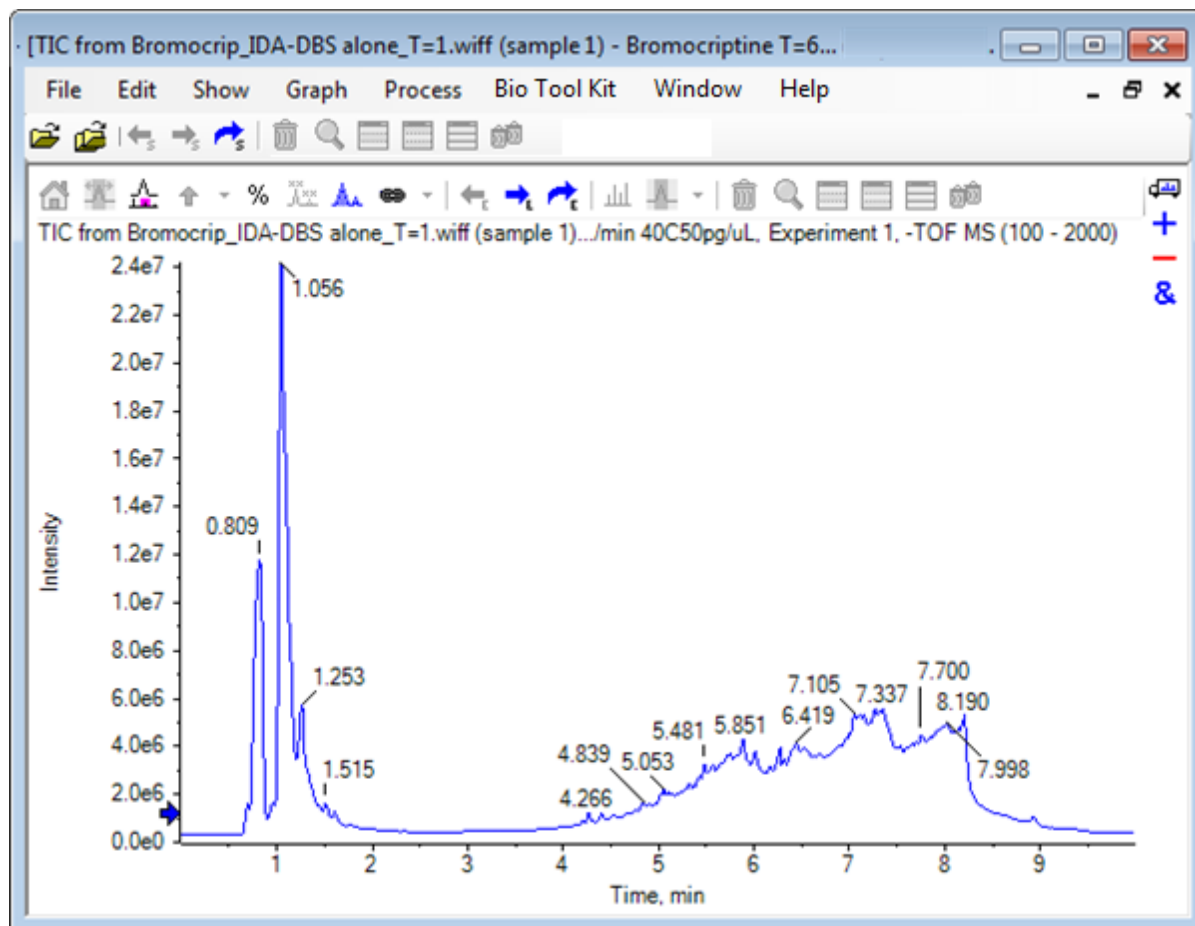
2. Clique com o botão direito dentro do painel do cromatograma ativo e depois clique em **Remove All Traces Except Active** para que somente o TIC da análise permaneça.

Figura D-23: Menu ativo com o botão direito



3. No mesmo painel, clique no ícone **Apagar todos os outros painéis** para deixar apenas o TIC da análise.

Figura D-24: TIC de análise



## Mostrar um XIC para uma fórmula molecular conhecida

Embora alguns picos aparentemente pequenos sejam óbvios no intervalo de 4 min a 7 min, é possível que muitos estejam escondidos pelo ruído de fundo, que é moderadamente intenso nesses dados. Como essa amostra corresponde a uma incubação microscópica de bromocriptina, use a faixa de  $m/z$  do íon molecular esperado como um guia inicial para a localização do pico. A fórmula molecular da bromocriptina é  $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$  e, como esses dados estão em modo negativo, nós esperamos ver um íon  $(M - H)^-$ .

1. Clique em **Show > Mass Calculators**.
2. Clique na aba **Mass Property** no painel **Mass Calculators**.
3. Digite a fórmula molecular no campo **Formula**.
4. Digite **-1** no campo **Charge state**.
5. Selecione o **'H+' charge agent (else electron)**.
6. Clique em **Calculate**.

## Tutorial do Explorer

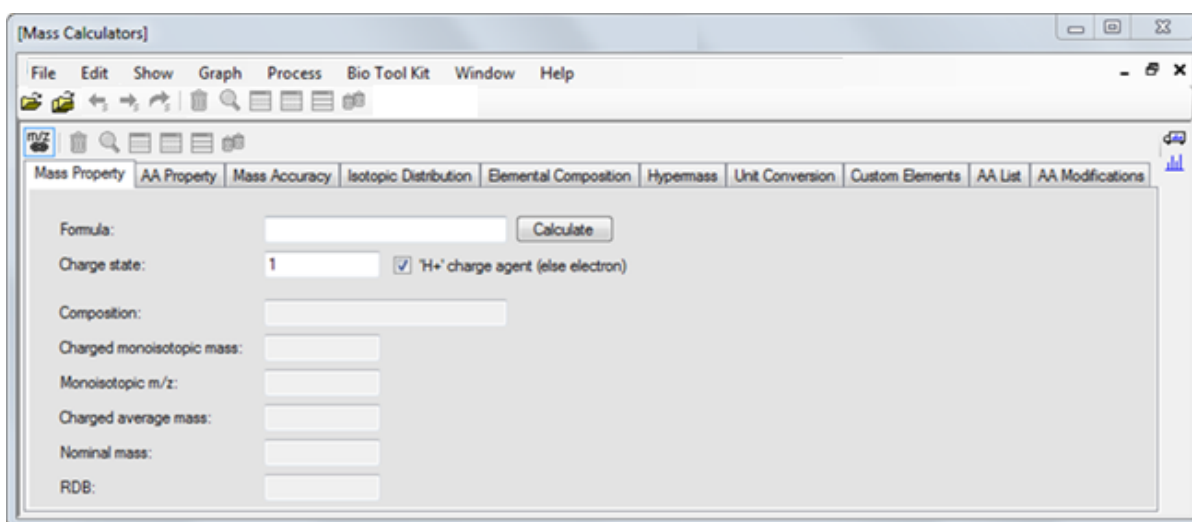
---

**Nota:** Também é possível remover manualmente um hidrogênio da fórmula molecular e não selecionar a opção 'H+' charge agent (else electron).

---

A caixa de diálogo é atualizada para mostrar vários valores de massa: monoisotópico, médio e assim por diante.

**Figura D-25: Painel Mass Calculators**

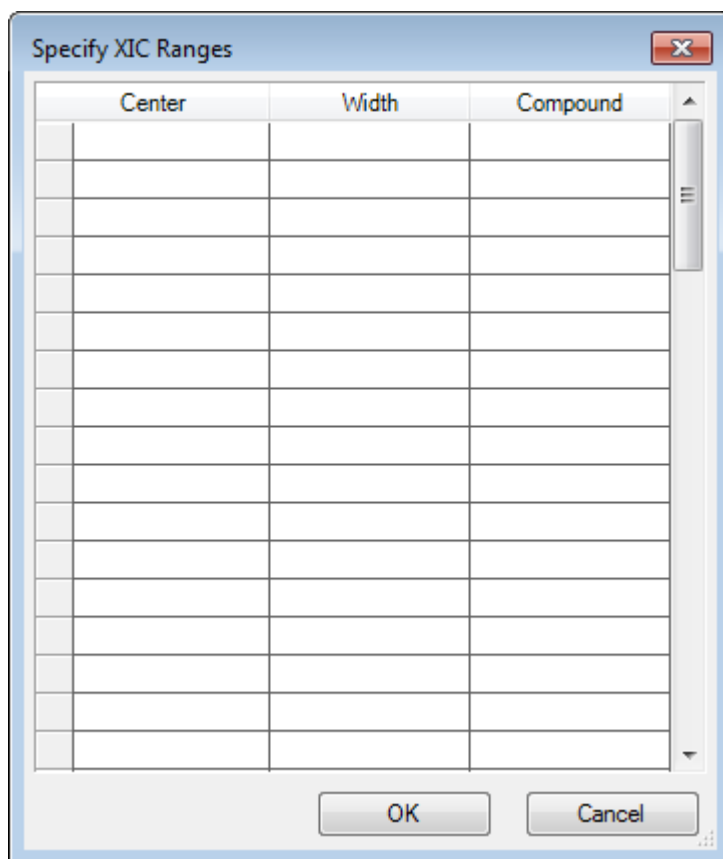


**Nota:** Com esses valores de massa, os isótopos são resolvidos com facilidade. Portanto, o valor m/z Monoisotópica é o mais apropriado.

---

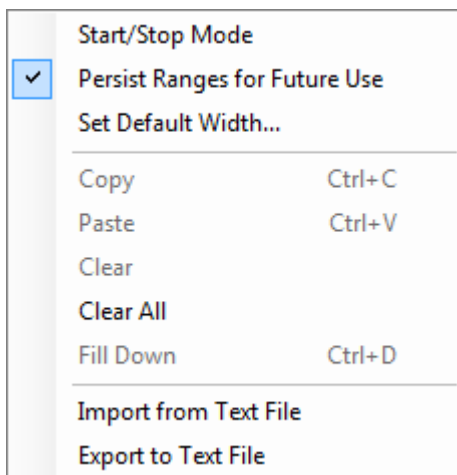
7. Selecione o valor **Monoisotopic m/z** e pressione **Ctrl+C** para copiar o valor para a área de transferência.
8. Clique no ícone **Excluir esse painel** para excluir o painel **Mass Calculators** ou clique no ícone **Ocultar esse painel** para ocultar o painel.
9. Clique em **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)** para abrir a caixa de diálogo **Specify XIC Ranges**.

Figura D-26: Caixa de diálogo Specify XIC Ranges



10. Clique com o botão direito na caixa de diálogo **Specify XIC Ranges** para abrir o menu.
11. No menu, faça o seguinte:
  - a. Garanta que a opção **Start/Stop Mode** não esteja selecionada, para que os valores de XIC sejam inseridos como um valor central e uma largura.
  - b. Clique em **Set Default Width**, digite **0,05** e depois clique em **OK**.
  - c. Clique em **Persist Ranges for Future Use** para que os valores sejam lembrados da próxima vez que a caixa de diálogo for usada.

**Figura D-27: Menu de contexto**



12. Retorne à caixa de diálogo **Specify XIC Ranges**.  
A caixa de diálogo agora é configurada, para que somente uma massa seja digitada para cada XIC de interesse e uma largura padrão seja usada.
13. Selecione a primeira célula sob **Center** e depois pressione **Ctrl+V** para colar o valor de massa da etapa 7.
14. Clique em **OK**.

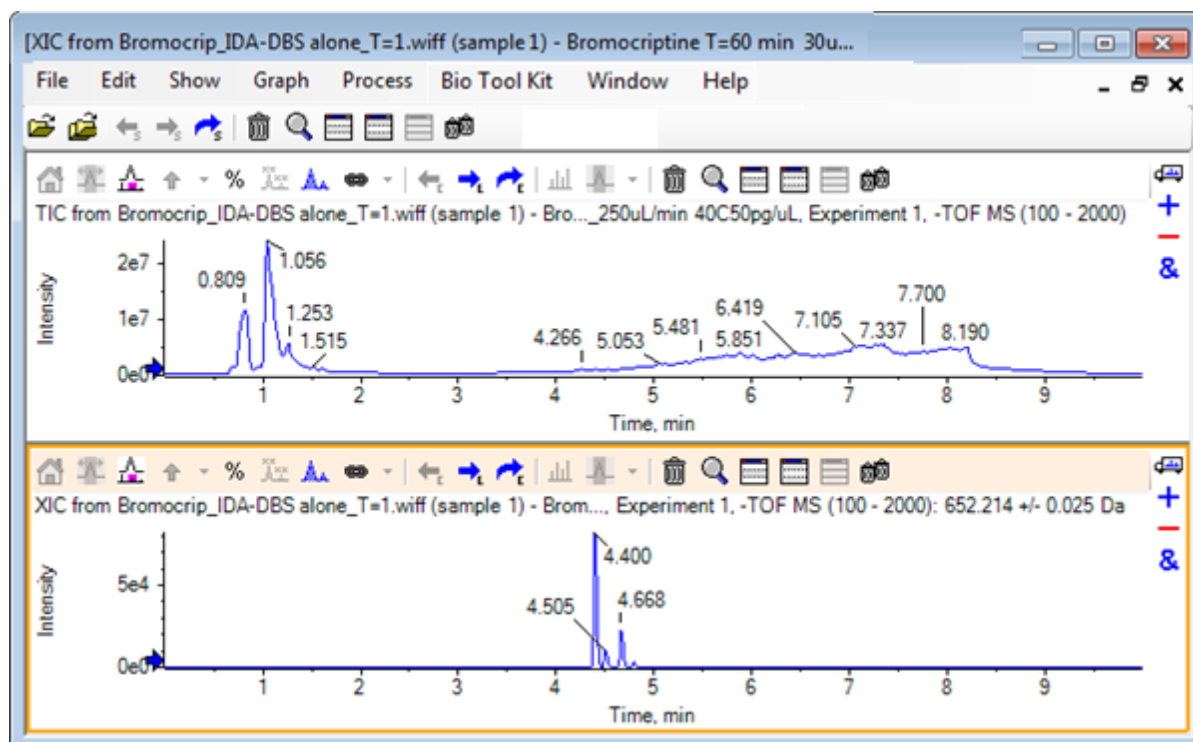
---

**Nota:** Como uma largura padrão foi configurada, não é necessário digitar um valor individual.

---

O painel agora contém o TIC e o XIC para íon molecular esperado de bromocriptina.

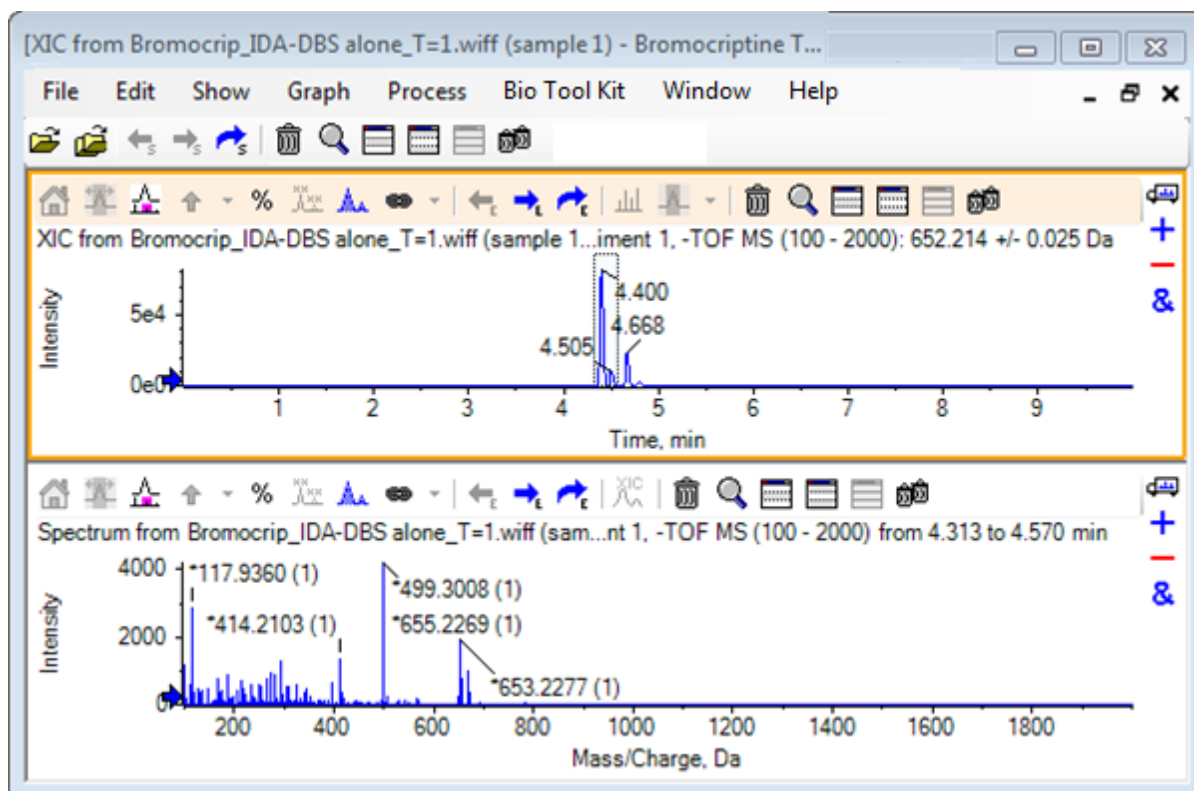
Figura D-28: TIC e XIC para o íon molecular esperado de bromocriptina



## Gerar e interagir com um espectro

1. Oculte o painel do TIC, faça uma seleção ao redor do maior pico no XIC, e depois clique no ícone **Exibir um espectro para seleção** para gerar o espectro médio para essa região.

Figura D-29: Espectro para o maior pico no XIC



**Nota:** Na [Figura D-29](#), o campo **Label** na aba **Peak Labeling & Finding** da caixa de diálogo **Options** (disponível por meio de **Edit > Options**) é configurado para **Mass (Charge)**.

2. Amplie o eixo X de aproximadamente 630 a 700 Da para aumentar o zoom do espectro nessa região.

**Nota:** Isso talvez precise ser feito em duas etapas.

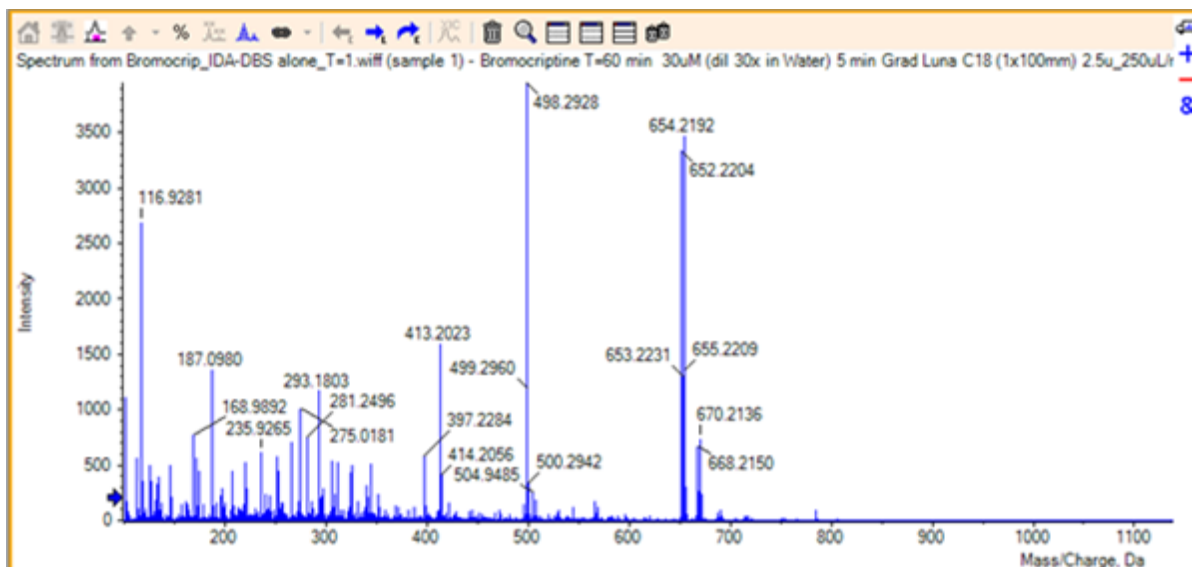
Existe um pico em 652,2199, muito próximo ao valor esperado de 652,2140, que também mostra o padrão isotópico do bromo, mas existe uma segunda agregação de isótopos de bromo começando em 668,2158. Os valores exatos de  $m/z$  diferem dependendo da janela do tempo de retenção selecionada no XIC.

**Nota:** O estilo de rotulagem usado aqui mostra uma faixa de  $m/z$  e uma estimativa do estado de carga em colchetes (com base no espaçamento entre os picos). Os picos que parecem ser monoisotópicos também estão marcados com um asterisco. O algoritmo de rotulagem não reconhece os isótopos diferentes de  $^{13}\text{C}$  e, então, rotula o isótopo  $^{81}\text{Br}$  como tendo carga única, mas o marca incorretamente como monoisotópico.

3. Altere o estilo de rotulagem para o estilo padrão, clicando em **Edit > Options**, navegando até a aba **Peak Labeling & Finding**, e depois alterando a configuração para **Mass / Charge** no campo **Label**.
4. Clique em **OK**.

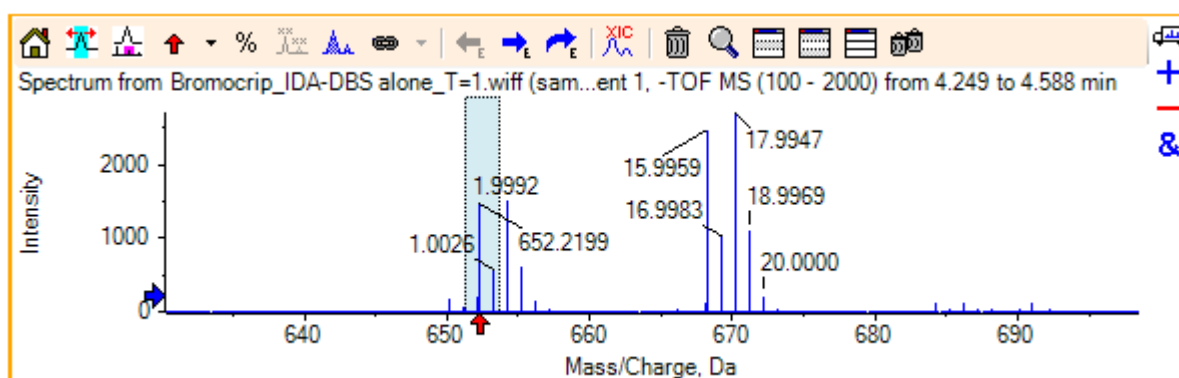


Figura D-30: Espectro com um estilo de rotulagem diferente



- No espectro expandido, faça uma seleção ao redor do pico em 652,2199 e depois clique no ícone **Incluir setas marcadoras para picos selecionados**.

Figura D-31: Espectro mostrado ↑ do pico selecionado



A rotulagem da massa agora é relativa ao pico selecionado, então, as diferenças entre os picos de massa são mostradas. O rótulo para o pico em 668,2158 agora aparece como 15,9959 correspondendo à massa de oxigênio e sugerindo que esse pico é o metabólito hidroxí-bromocriptina.

**Dica!** As setas podem ser movidas arrastando elas até outro pico e removidas selecionando **Remove All Arrows** da lista adjacente ao ícone da seta.

- Faça uma seleção ao redor do pico rotulado 15,9959 e clique no ícone **Exibir um XIC para a seleção**.
- Na caixa de diálogo **XIC Selection Ranges**, clique em **OK**.

Figura D-32: Caixa de diálogo XIC Selection Ranges

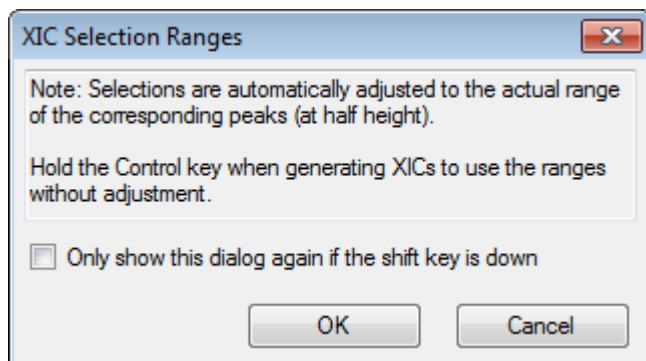
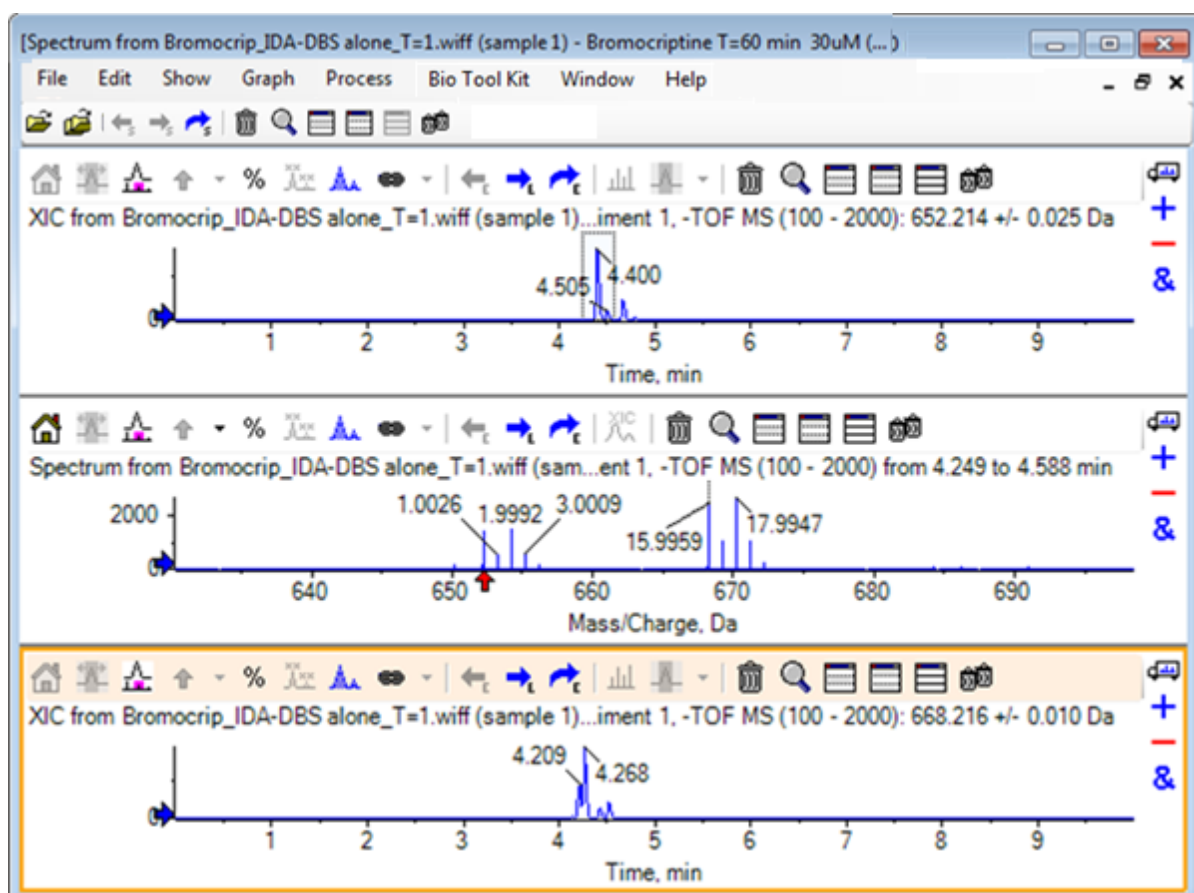


Figura D-33: XIC

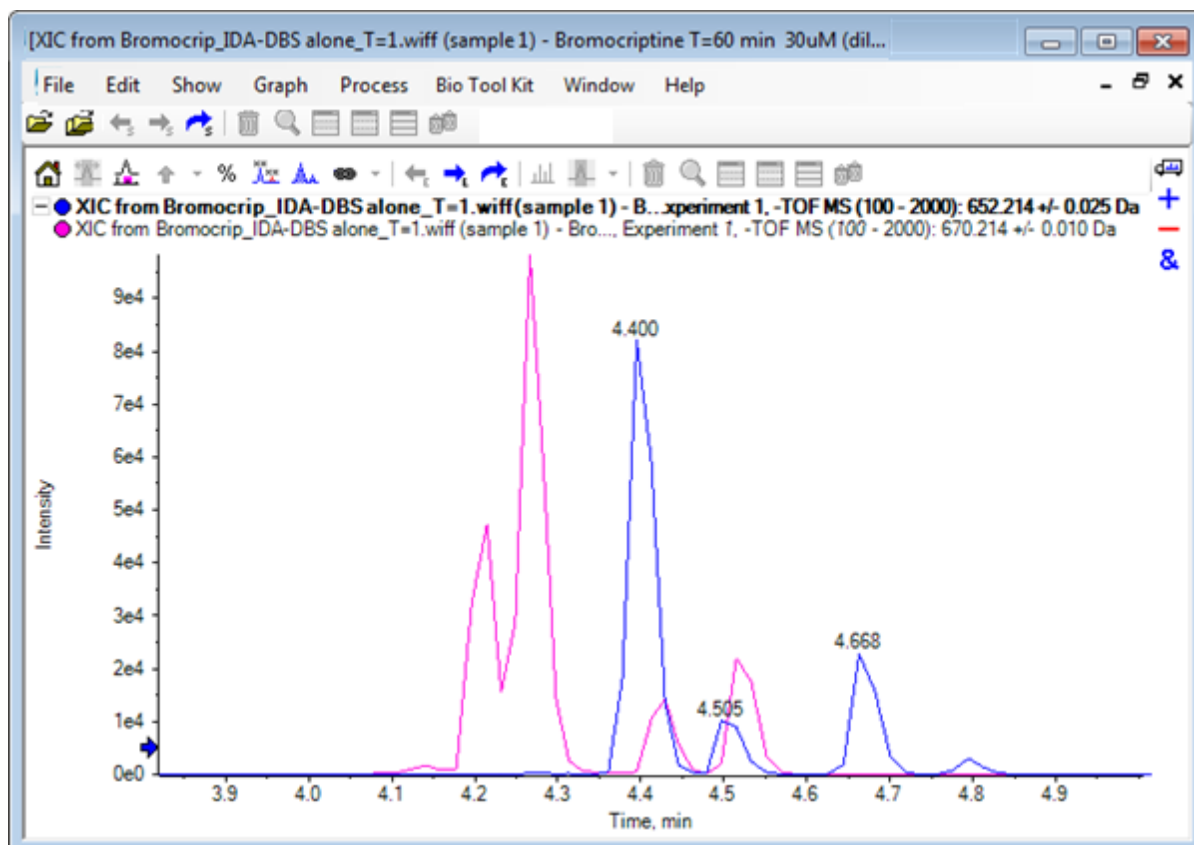


Essa é uma forma muito útil de gerar XICs interativamente. Por padrão, a largura usada para o XIC é a largura da massa do pico à meia altura e um vínculo de seleção é mostrado no espectro.

8. Arraste o vínculo selecionado para atualizar o XIC mostrado e, se desejar incluir mais XICs, basta apenas repetir esta etapa.

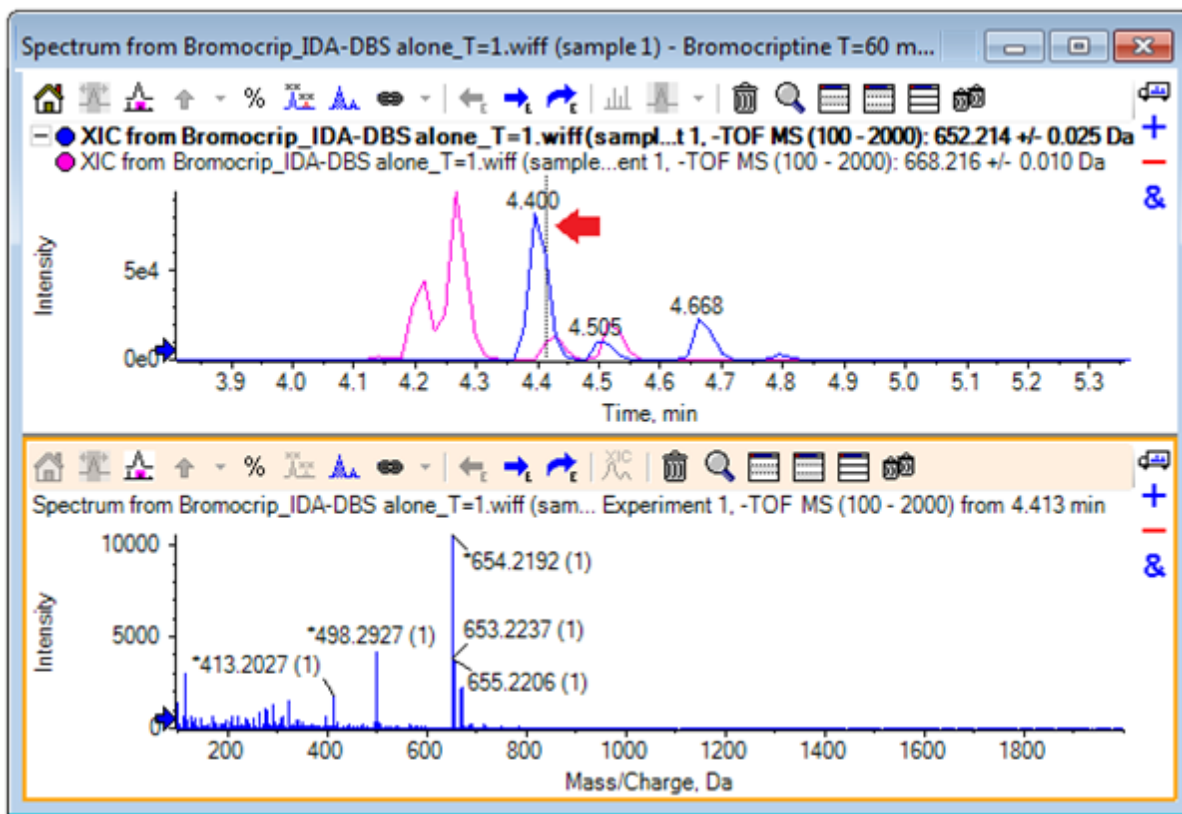
9. Clique no ícone **Arrastar para outro gráfico para sobrepor os dados ativos no gráfico de destino** nesse novo cromatograma e depois arraste o cromatograma ao painel de XIC original para que eles sejam sobrepostos.

**Figura D-34: XICs sobrepostos**



10. Oculte ou exclua o segundo painel do cromatograma e do espectro, e depois amplie os cromatogramas sobrepostos para mostrar a região entre aproximadamente 4 min a 5 min.  
Existem dois picos em torno dos 4,4 min., um de cada XIC, que eluem de forma semelhante, mas não exatamente no mesmo tempo de retenção. Também existem vários picos em 668,216 Da no cromatograma, indicando supostamente a presença de outros metabólitos hidroxilados.
11. Clique duas vezes no painel do cromatograma em 4,40 min para gerar o espectro a partir de uma varredura única.

Figura D-35: Espectro de uma única varredura



Uma linha pontilhada no XIC indica a varredura mostrada (marcada com uma seta na Figura D-35). Se a linha for arrastada, o espectro será atualizado para que a região próxima de 4,40 min seja explorada. Use as setas para frente e para trás do teclado para movimentar uma varredura por vez. É possível obter um espectro limpo para o pico com  $m/z$  de 652,214 ao mover a linha para uma região em que o sinal para o íon 668,215 é zero (mesmo que aqui o ruído de fundo seja bem alto), mas um espectro limpo para o último não pode ser obtido dessa forma.

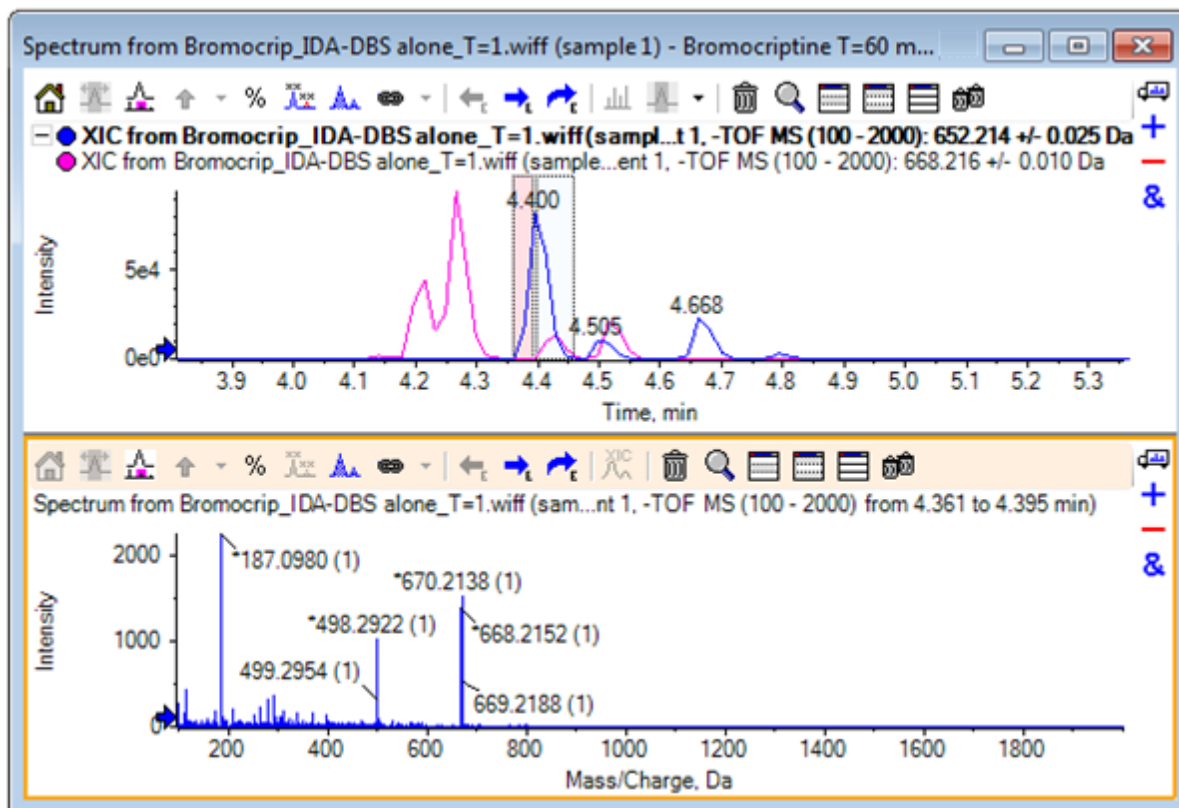
12. Exclua o painel do espectro.
13. No painel do cromatograma, faça uma seleção estreita que inclua o lado esquerdo do pico 652, mas evite o pico 668 e depois clique no ícone **Configurar faixa de subtração do ruído de fundo**.

A seleção ficará rosa.

Quando uma faixa de subtração tiver sido definida, ela será automaticamente subtraída de qualquer espectro gerado posteriormente. A faixa pode ser apagada selecionando **Clear Subtraction Range**, na lista acessada por meio de uma seta pequena à direita do ícone **Configurar faixa de subtração**.

14. Faça outra seleção no cromatograma que inclua o vértice do pico 668, mas o mínimo possível do pico 652, depois clique no ícone **Exibir um espectro para seleção**.

Figura D-36: Espectro subtraído do ruído de fundo para o pico 668



O resultado é um espectro subtraído do ruído de fundo para o pico 668, que contém o pico 652 com baixa intensidade. Ambas as seleções no cromatograma permanecem vinculadas aos seus respectivos espectros, mesmo que o ruído de fundo não esteja visível, e podem ser movidas para outras partes do cromatograma. Mover a seleção do espectro atualiza automaticamente o espectro mostrado, mas se a região do ruído de fundo for alterada, então, ela apenas será aplicada aos espectros gerados posteriormente.

15. Clique no ícone **Ocultar todos os outros painéis**, clique no TIC do espectro único e depois clique no ícone **Apagar todos os outros painéis** para mostrar somente o TIC.
16. Se o painel do TIC for excluído, clique em **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**, selecione **Period 1, Experiment 1** e depois clique em **OK**.

## Usar um gráfico de contorno

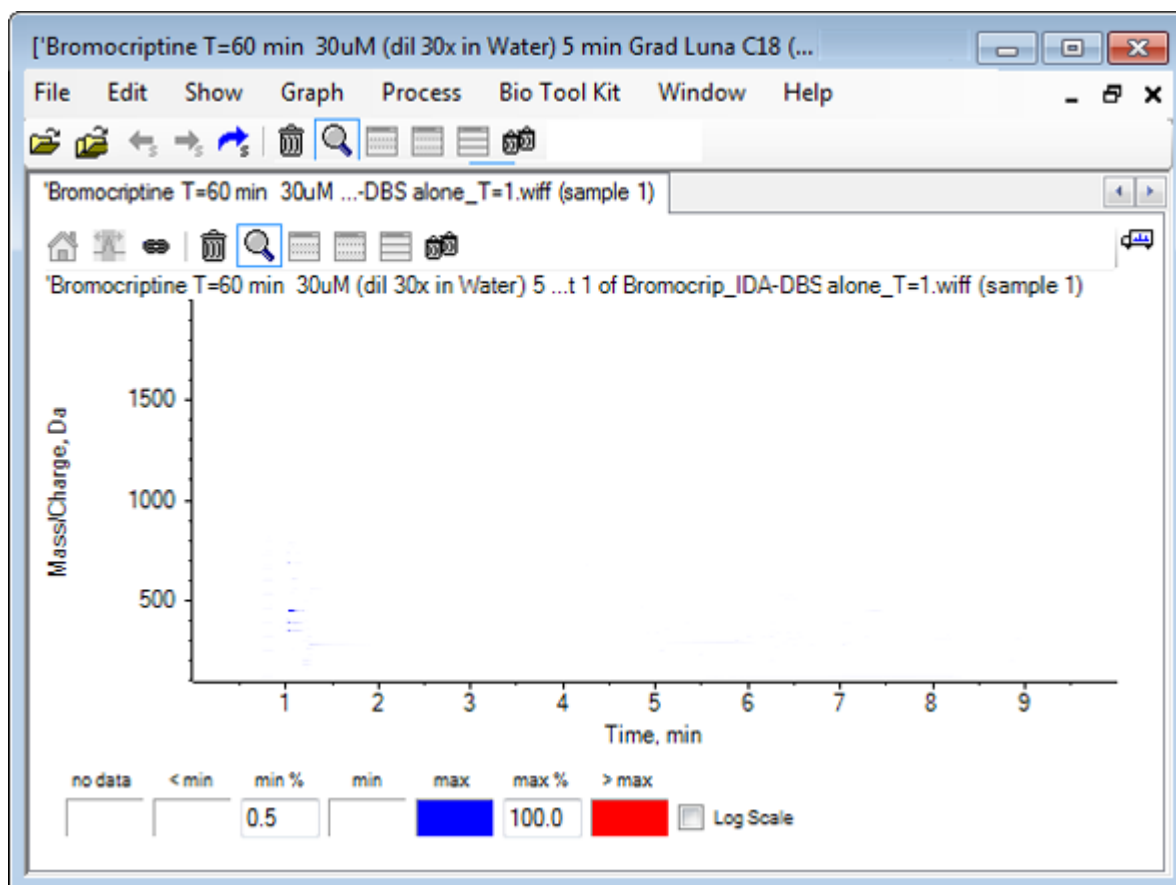
Uma alternativa para visualizar partes de um conjunto de dados (cromatogramas ou espectros) é usar um Gráfico de contorno para obter uma visão geral completa de um experimento. Os gráficos de contorno podem ser muito informativos, mas, geralmente, é necessário ajustar os parâmetros de visualização para obter os melhores resultados. Nesse caso, o composto precursor é bromado e o gráfico de contorno oferece uma forma de localizar os picos com o padrão isotópico do bromo.

## Tutorial do Explorer

---

1. Com o TIC de experimento único ativo, clique em **Show > LC/MS Contour Pane** e depois clique no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela** na barra de ferramentas do Gráfico de contorno resultante, para que ele seja o único painel visível.
2. Se os controles de aparência (caixas de cor no canto inferior esquerdo) não estiverem visíveis, clique com o botão direito no painel e clique em **Show Appearance Control**. Consulte o [Gráficos de contorno e mapas de calor](#) e o *Guia de referência*.

**Figura D-37: Gráfico de contorno**



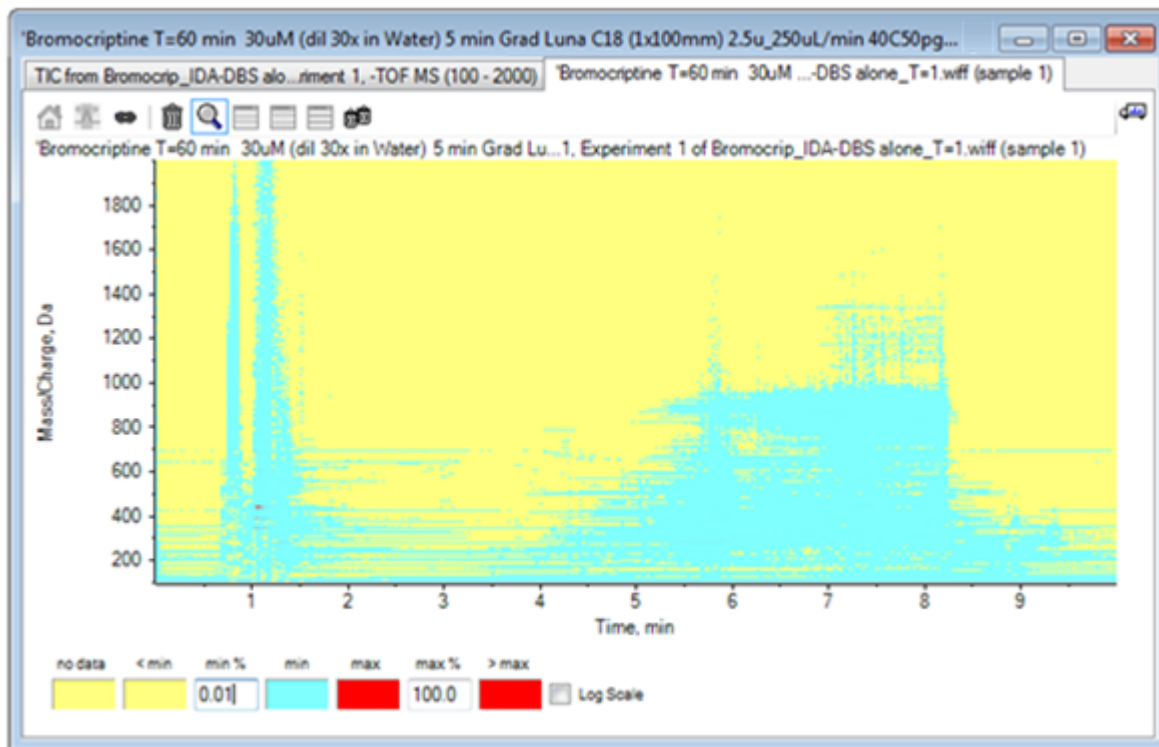
---

**Dica!** Com os parâmetros predefinidos, a visualização não é muito útil, pois é dominada por picos de baixo nível e ruídos que obscurecem os picos reais. Gere uma visualização melhor ao:

- Alterar a intensidade mínima a ser mostrada. Isso altera todos os pontos de dados abaixo desse nível para serem desenhados na mesma cor que os pontos em que não há dados, ou seja, eles ficam invisíveis.
  - Alterar a cor do mapeamento para que as cores disponíveis abranjam uma faixa de intensidade menor, o que melhora a visibilidade dos pequenos picos.
- 
3. Alterar o valor mínimo de % para **0,01**. Isso faz com que todos os pontos de dados com intensidades menores que 0,01% do pico de base desapareçam.



Figura D-38: Gráfico de contorno



Muito mais da estrutura nos dados é mostrado. O volume morto e a área de limpeza de coluna estão vazios e existem vários picos de fundo que estão presentes em todos os tempos de retenção e são mostrados como linhas horizontais.

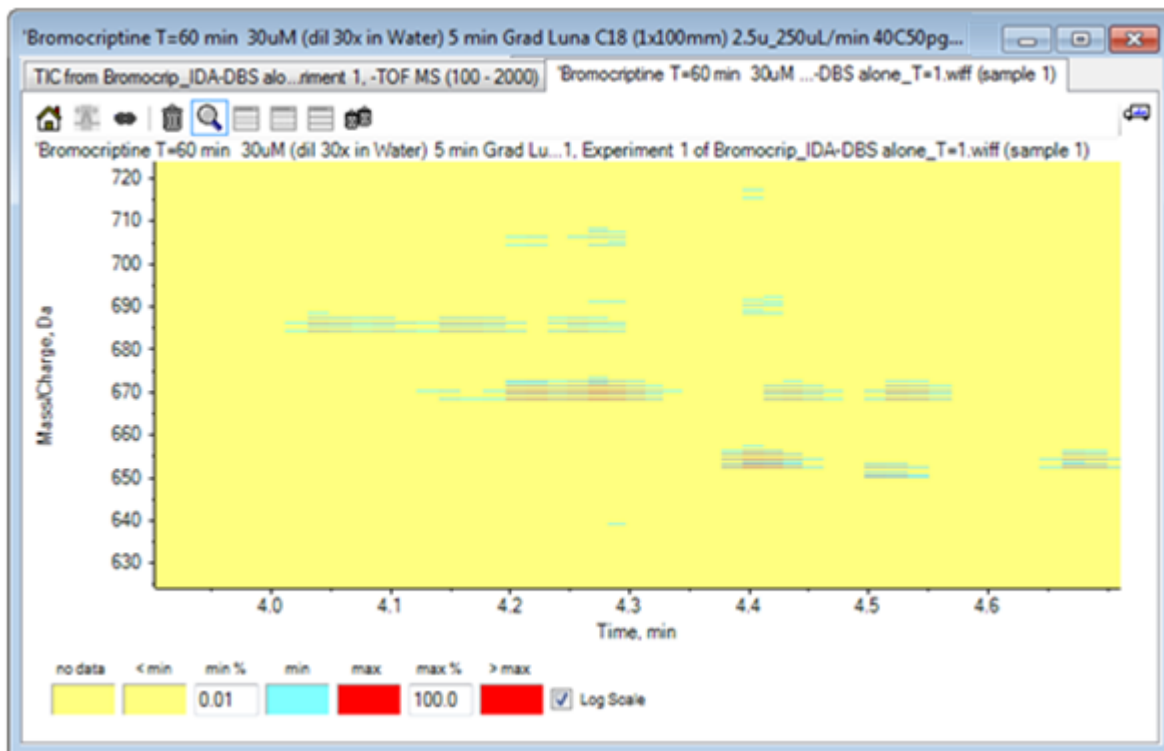
4. Marque a opção **Log scale**.  
As cores selecionadas são mapeadas ao logaritmo de intensidade (como uma porcentagem da intensidade do pico de base), que possui o efeito de melhorar os menores picos de intensidade, por exemplo, a agregação em torno de 4 min a 4,5 min com massas no intervalo de 600 a 700.
5. Selecione essa região e depois clique no ícone **Dar zoom na seleção para visualização total**.

---

**Dica!** Também é possível dar zoom nos eixos x e y, independentemente, da forma comum.

---

Figura D-39: Gráfico de contorno



A visualização mostra agora que existem vários picos bromados nessa área que podem ser diferenciados pelos conjuntos de quatro linhas paralelas que correspondem ao isótopos  $^{79}\text{Br}$  e  $^{81}\text{Br}$  e seus isótopos  $^{13}\text{C}$ .

6. Experimente as configurações de controle de cor e observe os efeitos na visualização.
7. Quando terminar, feche a janela.  
Isso também fecha o arquivo de dados.

## Resumo

Nesta seção, as seguintes tarefas foram discutidas:

- Navegando e abrindo um arquivo de dados para mostrar um TIC.
- Alterando a visualização para que somente um experimento seja usado.
- Usando a calculadora de massa para determinar a massa de um íon de uma composição elementar e usando isso para gerar um XIC.
- Gerando espectros e cromatogramas interativamente e usando setas marcadoras nos espectros para mostrar a diferença de massa entre os picos.
- Gerando um espectro com ruído de fundo subtraído.
- Usando um gráfico de contorno para visualização geral de um conjunto de dados.

Essas operações são a base de todo o processamento de dados, independentemente do tipo de dado sendo mostrado.



## Trabalhar com o explorador de IDA

Em um experimento IDA, os dados do espectro MS/MS (e possivelmente MS3) são coletados automaticamente quando as informações em um ou mais espectros da análise atendem a determinados critérios. É comum configurar os parâmetros para evitar coletar vários espectros do mesmo pico de LC ao excluir a massa do precursor (não permitindo que ela aja como um acionador) por determinado período de tempo. Ocasionalmente, espectros redundantes podem ser coletados. Além disso, como o IDA é acionado assim que um pico atende determinados critérios, ele geralmente gera um espectro anterior ao pico de LC, podendo não adquirir um espectro de boa qualidade.

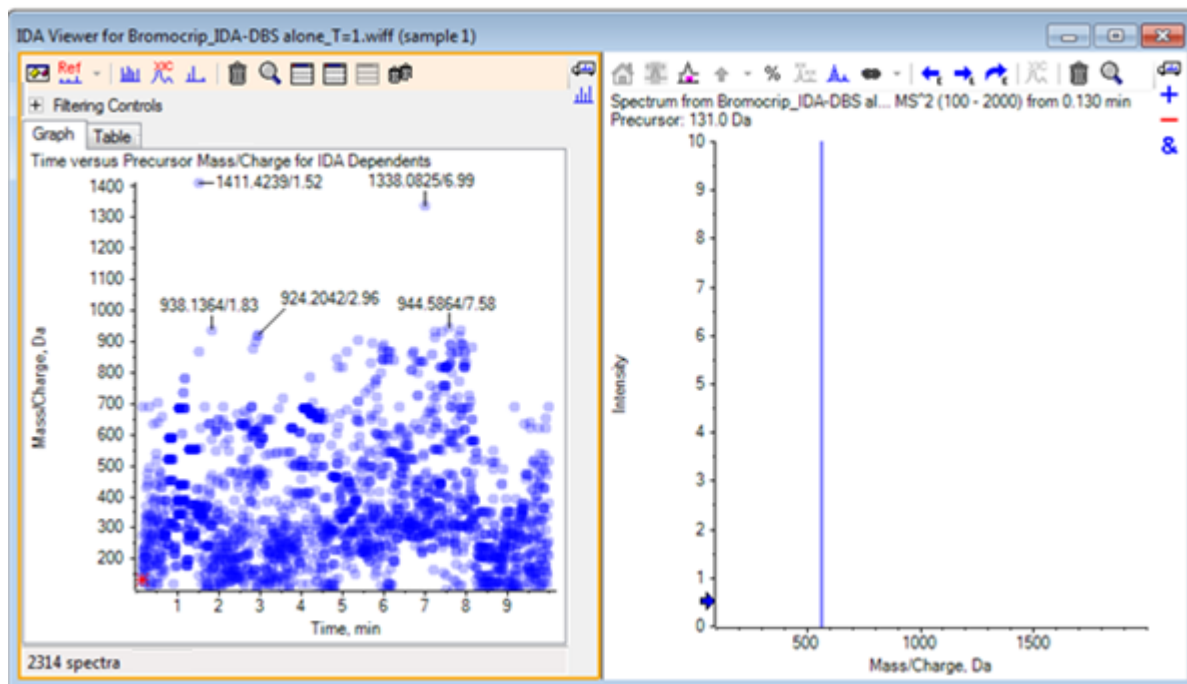
O software contém ferramentas para mostrar, filtra e processar dados de IDA. Algumas destas ferramentas serão exploradas nessa seção.

Feche qualquer janela aberta antes de iniciar.

### Mostrar e juntar espectros

1. Clique no ícone **Abrir amostra** na barra de ferramentas principal. A caixa de diálogo **Select Sample** se abre.
2. Se a pasta **Sample Data** não estiver selecionada, clique em **Browse** e navegue até a pasta **Sample Data**.
3. Selecione o arquivo **Bromocrip\_IDA-DBS alone\_T=1.wiff** e depois clique em **OK**.
4. Na caixa de diálogo **Open IDA Sample**, clique em **With the IDA Explorer** e depois clique em **OK**.  
O programa examina todos os espectros no arquivo de dados e depois gera o gráfico a seguir.

Figura D-40: Visualizador IDA



O painel esquerdo contém uma aba **Graph** e uma aba **Table**. A aba **Graph** mostra um gráfico de contorno virtual em que cada ponto de dados representa o tempo de retenção e a faixa de  $m/z$  de um íon que foi selecionado como um íon precursor. A aba **Table** mostra uma visualização tabular dos pontos de dados no gráfico de contorno virtual. O painel direito mostra o espectro para os pontos de dados selecionados. Inicialmente, o primeiro espectro MS/MS é mostrado.

O gráfico de contorno usa a intensidade da cor para refletir a intensidade do pico. As cores mais escuras indicam picos mais intensos. Os rótulos são representados onde possível, garantindo que eles não sobreponham pontos de dados ou uns aos outros. Dê zoom no gráfico de contorno para examinar uma área com mais detalhes e mostrar mais rótulos.

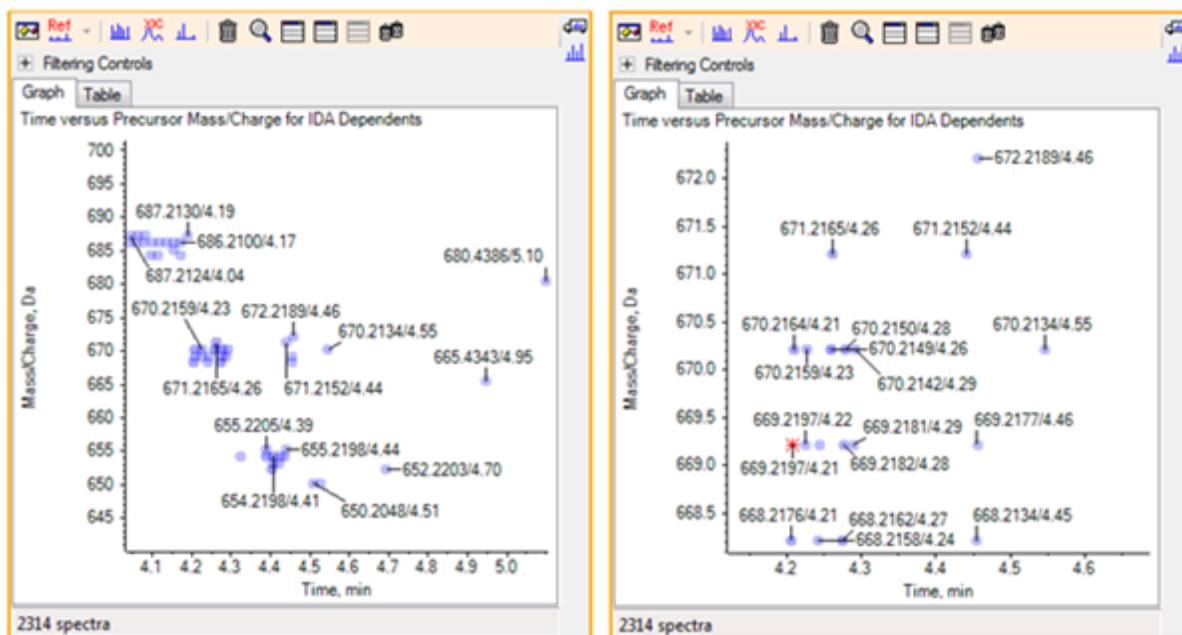
5. No painel esquerdo, aumente o zoom da região de 4 min para 5 min e de 640 Da para 700 Da em que os picos relacionados à bromocriptina foram mostrados anteriormente.

A figura à esquerda ([Figura D-41](#)) mostra apenas o painel esquerdo. Se a visualização atual for diferente, clique no ícone **Mostrar opções** e desmarque a opção **Merge spectra with similar precursor masses** na aba **General** da caixa de diálogo **Options**.

Um grande número de espectros MS/MS foi coletado nessa área e, embora os picos cromatográficos sejam muito estreitos, vários desses íons são provavelmente dos mesmos picos. Além disso, os espectros MS/MS foram coletados para pico com seu respectivo padrão isotópico.

6. Amplie o gráfico na região de faixa de  $m/z$  de 668 até 672 Da. Consulte o painel direito na [Figura D-41](#).

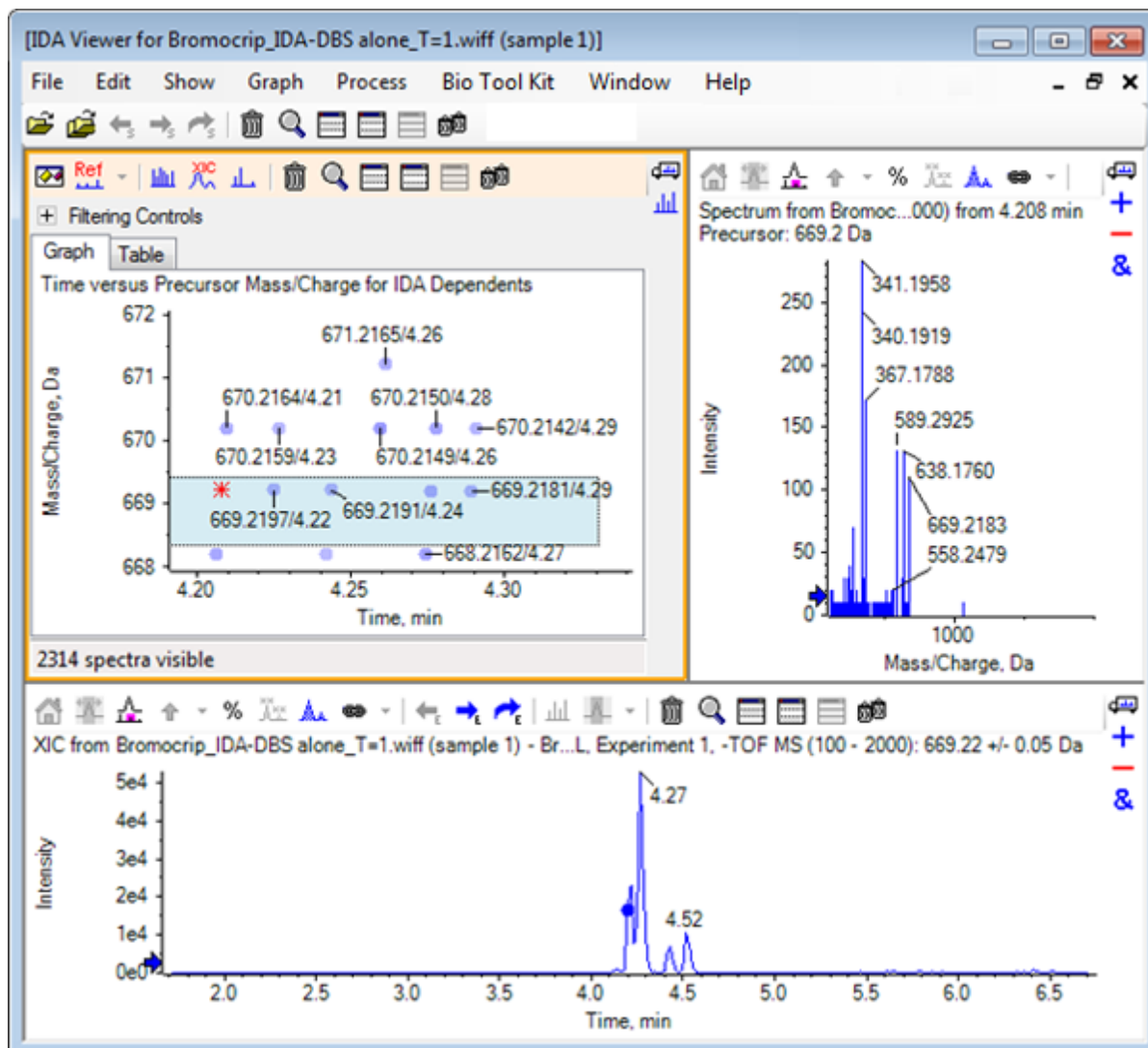
Figura D-41: Visualizador IDA



7. Selecione o primeiro dos picos de valor 669,2197 (mostrado como um asterisco no painel direito acima) e depois clique no ícone **Exibir um XIC para seleção** para mostrar o XIC para essa massa precursora na varredura da análise.

Selecionar inicialmente o pico faz com que o espectro MS/MS correspondente seja mostrado.

Figura D-42: XIC para a massa do precursor em uma varredura de análise



Se houver um ponto de dados sem rótulo no gráfico de contorno, mova o cursor sobre ele para mostrar a faixa de  $m/z$  e a legenda de tempo de retenção para que os tempos das varreduras de íons produto sejam relacionados ao cromatograma da análise.

Para o pico 669,2, as primeiras três varreduras estão relacionadas ao primeiro pico de XIC em 4,21 min, que é também onde uma varredura de 668,2 foi gerada; as duas segundas varreduras estão relacionadas ao pico em 4,27 min, e a última varredura é do pico em 4,42 min (669,2177/4,46). Nenhuma varredura foi realizada para o pico 669,2 aos 4,52 min, mas uma varredura foi obtida para o pico 670,2.

**Nota:** Os tempos de varredura são ligeiramente diferentes, porque são obtidos sequencialmente, mesmo se forem detectados na mesma varredura de análise. Os menores picos do isótopo podem não ser detectados tão rapidamente quando os maiores.

8. Desenhe um retângulo de seleção ao redor das primeiras cinco varreduras de 669,2, clique com o botão direito, e depois selecione **Select Points in Graph Selection**.

Isso faz com que o painel do espectro sobreponha todos os espectros de MS/MS.

O sistema obteve mais varreduras do que o necessário. Ao reduzir o número de espectros para processar e juntar aqueles que estão muito próximos para serem compostos diferentes, pode-se obter resultados de melhor qualidade. A junção usa a massa e o tempo de retenção para determinar essas varreduras.

9. Clique no ícone **Mostrar opções**, marque a opção **Merge spectra with similar precursor masses** e depois configure a **Mass tolerance** para **10** ppm e a **RT gap tolerance** para **0,03** min. (os picos nessa análise são de aproximadamente 2 segundos).
10. Clique em **OK**.

---

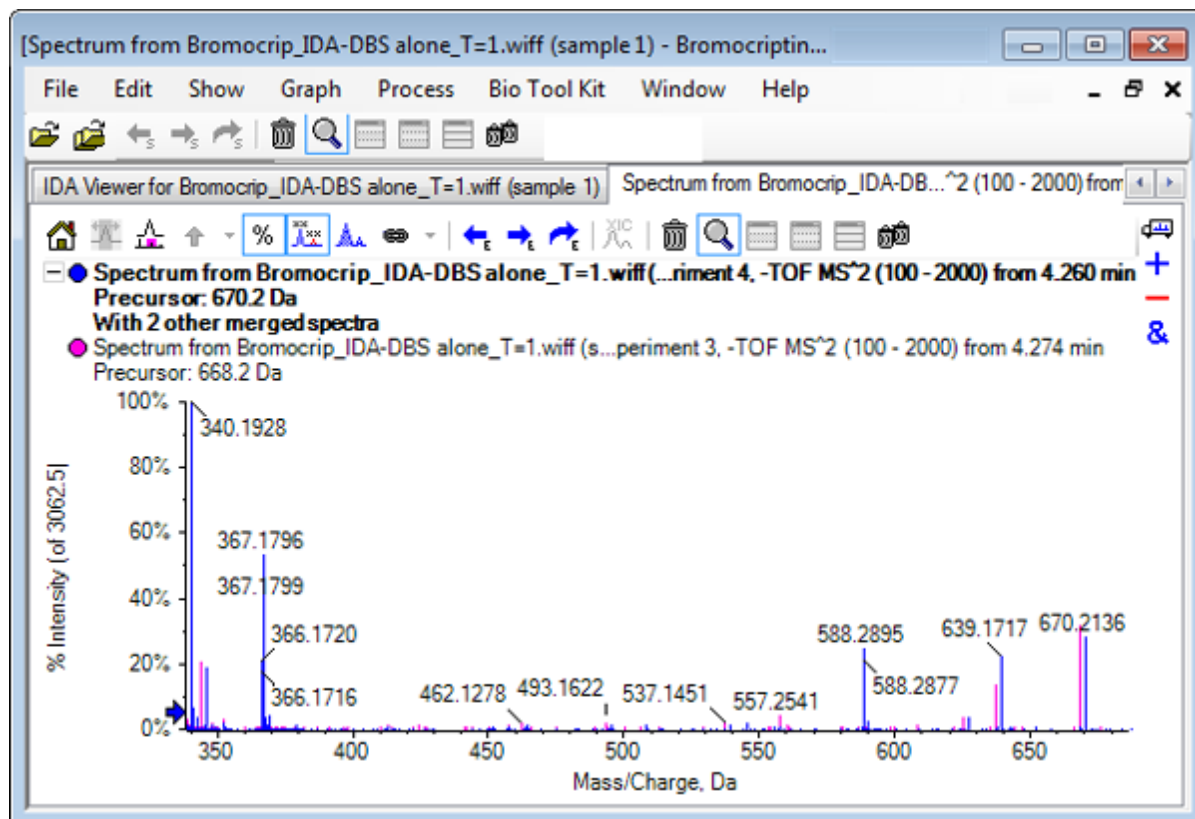
**Nota:** Essa parte da caixa de diálogo também permite que os usuários definam como os XICs devem ser extraídos. A largura da massa deve corresponder à largura da resolução ou do pico do instrumento e é útil para limitar o intervalo de tempo usado, porque isso acelera o processamento.

---

Juntar os dados dessa forma resulta em três picos para 669,2 em 4,21, 4,28 e 4,46 min. A barra de status na parte inferior do painel visualizador de IDA mostra o progresso à medida que os dados estão sendo mesclados e depois mostra o número total de espectros dependentes depois que a junção estiver concluída.

11. Clique no ponto de dados em 670,2149/4,26 e depois pressione a tecla **Ctrl** e clique no ponto em 668,2162/4,27.
12. No painel de espectro MS/MS, clique no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela**, o ícone **Usar por cento eixo y** e ícone **Rotular todos os traços sobrepostos** e depois dê zoom no eixo x para mostrar a região de 340 a 680.

Figura D-43: Espectro: região de  $m/z$  340 a 680 ampliada



Como esses dois precursores correspondem aos isótopos de Br, os espectros devem ser idênticos, exceto para os íons que retêm o átomo Br, que são mostrados como um par de picos separados por dois Da. Nesse exemplo, os fragmentos (traço 668,2) em 344,0441, 625,1765, e 637,1712 contêm o átomo de Br enquanto fragmentos em 340,1925, 367,1796 e 588,2877 não contêm.

Coloque uma seta no pico 588,2877 e observe que os picos 668 e 670 agora estão rotulados com a massa dos isótopos de Br mais 1, indicando que o pico em 588,2877 corresponde à perda de HBr.

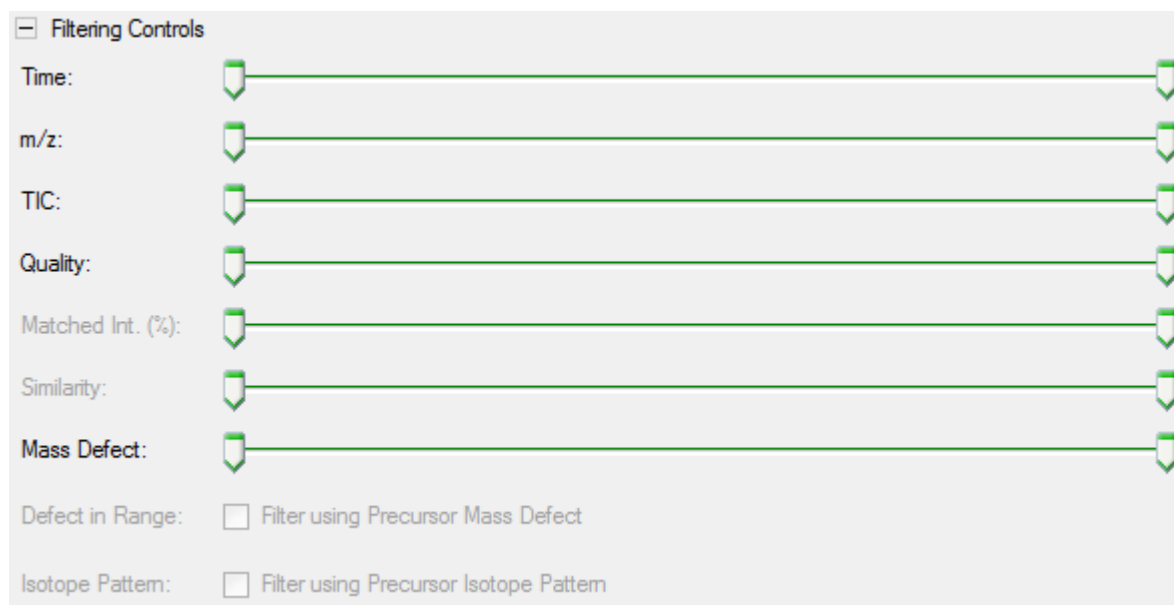
13. Remova a seta do espectro, clique no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela** e depois dê zoom no gráfico de contorno para ver todos os pontos.

## Filtrar dados IDA

O explorador IDA contém vários filtros que podem ser usados para reduzir a quantidade de dados a ser visualizada ou processada. Isso será descrito nessa seção.

1. No gráfico de contorno, clique no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela** e depois clique no ícone próximo a **Filtering Controls** abaixo da barra de ferramentas.

Figura D-44: Filtrando dados IDA



Esta janela mostra várias opções de ajuste e caixas de marcação, cada um correspondendo a um critério de filtragem diferente, que pode ser usado para ajustar a quantidade de dados mostrados. O tempo de retenção (**Time**) e a faixa de  $m/z$  (**m/z**) podem ser selecionados aqui ou dando zoom na painel.

Os outros filtros são os seguintes:

- **TIC**: configura limites para a intensidade somada dos picos no espectro MS/MS. Isso geralmente é usado para remover varreduras pequenas e com ruídos.
- **Quality**: essa é fração da intensidade somada que é maior que o equivalente de 1 contagem, ou seja, é menos provável que seja devido ao ruído, e é uma estimativa da qualidade espectral.
- **Matched Int. (%)**: avalia a fração da intensidade somada, explicada por fragmentos conhecidos e perdas neutras ao usar **Fragment Matching**.
- **Similarity**: disponível quando um espectro de referência for configurado. Este recurso mede a fração da intensidade somada que corresponde aos fragmentos comuns e perdas neutras no espectro de referência. Consulte a [Usar um espectro de referência](#).
- **Mass Defect**: configura uma faixa única para a fração decimal de uma massa. Este recurso é útil para localizar metabólitos, porque as transformações metabólicas comuns (O, O<sub>2</sub> e assim por diante) não mudam significativamente o defeito da molécula precursora, então, usar uma faixa próxima a seu defeito pode revelar possíveis metabólitos.
- **Defect in Range**: além da faixa única de defeito da massa, o software também permite que os usuários definam vários defeitos que se aplicam a faixas de massa diferentes. Se tais faixas foram definidas, essa caixa de marcação permite que os

usuários determinem se aplicam o filtro ou não. As faixas são configuradas na aba **Mass Defect** na caixa de diálogo **Options**.

- **Isotope pattern**: com esta caixa de seleção, os usuários aplicam um ou mais filtros do padrão isotópico aos dados de pesquisa de MS. Ou seja, as informações apareceram somente se o íon precursor selecionado tiver o padrão desejado. Esses padrões são definidos na aba **Isotope Pattern** da caixa de diálogo **Options**.

Cada um dos filtros possui dois controles de ajuste, para que uma faixa possa ser definida. Clique duas vezes em qualquer controle e digite diretamente um valor.

2. Experimente com as configurações dos controles deslizantes e perceba que, mesmo os valores mínimos usados na configuração do **TIC** (por exemplo, 1e3) ou **Quality** (1) possuem um efeito significativo. Configure o valor mínimo de **TIC** para 2e3 e todos os outros para 0.

O defeito de massa da bromocriptina é aproximadamente 0,22, então não é provável que metabólitos simples tenham valores maiores que esse ou muito menores.

3. Defina os filtros de **Mass Defect** entre 0,18 e 0,23 e observe que, entre os picos remanescentes, existem aqueles que se aproximam de 4,5 min e 650 Da e que existe apenas um ponto de dados de uma relação de  $m/z$  de 652,2211 nesta região (4,40 min).
4. Oculte os controles de filtro clicando no ícone próximo a **Filtering Controls**.

---

**Dica!** Altere quais filtros são visíveis, clicando com o botão direito na área do filtro, selecionado **Filters** e depois selecionando todos os apropriados.

---

## Usar um espectro de referência

1. No gráfico de contornos, clique no ponto de dados em 652,2211/4,40 (própria bromocriptina) e depois clique no ícone **Configurar o espectro de referência (para classificação por similaridade)**.

---

**Nota:** Pode ser necessário dar zoom no gráfico primeiro.

---

2. Clique na seta ao lado do ícone **Configurar o espectro de referência (para classificação por similaridade)** e depois certifique-se de que **Overlay Reference Spectrum** esteja selecionado.
3. Clique no ponto em 654,2185/4,39.

Com um espectro de referência definido e **Overlay Reference Spectrum** selecionado, qualquer espectro mostrado também possui o espectro de referência sobreposto para que possam ser facilmente comparados. Isso é útil ao trabalhar com metabólitos, porque fornece uma maneira rápida de determinar quais picos são alterados e quais não são.

Desse modo, tornamos o espectro MS/MS do íon precursor para o isótopo de bromo de menor massa a referência e sobrepusemos o espectro para o isótopo de maior massa, então, temos uma visualização semelhante àquela gerada anteriormente para o pico 688,2. Ou seja, os íons contendo bromo podem ser identificados pela presença de picos com distância de dois Da entre eles.



4. Clique no ícone **Expandir o painel ativo para preencher a janela** e depois, no gráfico de contorno, clique em **Table** (logo abaixo de **Filtering Controls**).

---

**Nota:** Se necessário, mova o painel do espectro abaixo da tabela (arrastando e soltando o painel para reorganizar os ícones) para que todas as colunas fiquem visíveis.

---

A tabela mostra as mesmas informações que o explorador gráfico, mas fornece detalhes adicionais. Ela também responde aos controles de filtro para que as duas visualizações contenham os mesmos espectros. A tabela é vinculada à visualização do espectro para que a seleção das linhas faça com que o espectro seja atualizado e as linhas possam ser organizadas clicando nos cabeçalhos das colunas.

Quando um espectro de referência é definido, duas colunas extras são mostradas:

**Delta m/z** mostra a diferença da massa precursora da referência e o espectro correspondente à linha. **Similarity** mostra a semelhança entre dois espectros.

5. Clique em **Delta m/z** para organizar a tabela e observar que ela contém vários picos diferindo em aproximadamente 15,995 (a massa do oxigênio) e um a 31,990 (O<sub>2</sub>), que são prováveis metabólitos de hidroxibromocriptina.
6. Clique em uma linha na tabela para mostrar os espectros associados.

---

**Nota:** Esses espectros possuem valores que indicam alta semelhança, assim como as varreduras com as massas do precursor com dois Da a mais, que foram obtidos dos íons com <sup>81</sup>Br.

---

## Resumo

Nesta seção, as seguintes tarefas foram discutidas:

- Examinar um arquivo IDA usando as visualizações gráficas e tabulares do IDA Explorer.
- Mesclar espectros relacionados depois de determinar o que é necessário.
- Filtrar o número de espectros mostrados usando TIC e filtros de defeito de massa.
- Sobrepor espectros para que eles possam ser comparados.
- Definir um espectro de referência e usar a tabela para encontrar metabólitos prováveis.

Essas operações são fundamentais para processar dados IDA.

A próxima seção descreve como usar as ferramentas de estrutura usando o espectro MS/MS da bromocriptina.

## Trabalhar com ferramentas de estrutura

O software contém ferramentas para ajudar a vincular as massas dos íons a estruturas (salvas como arquivos .mol) e a explorar locais possíveis para biotransformações.

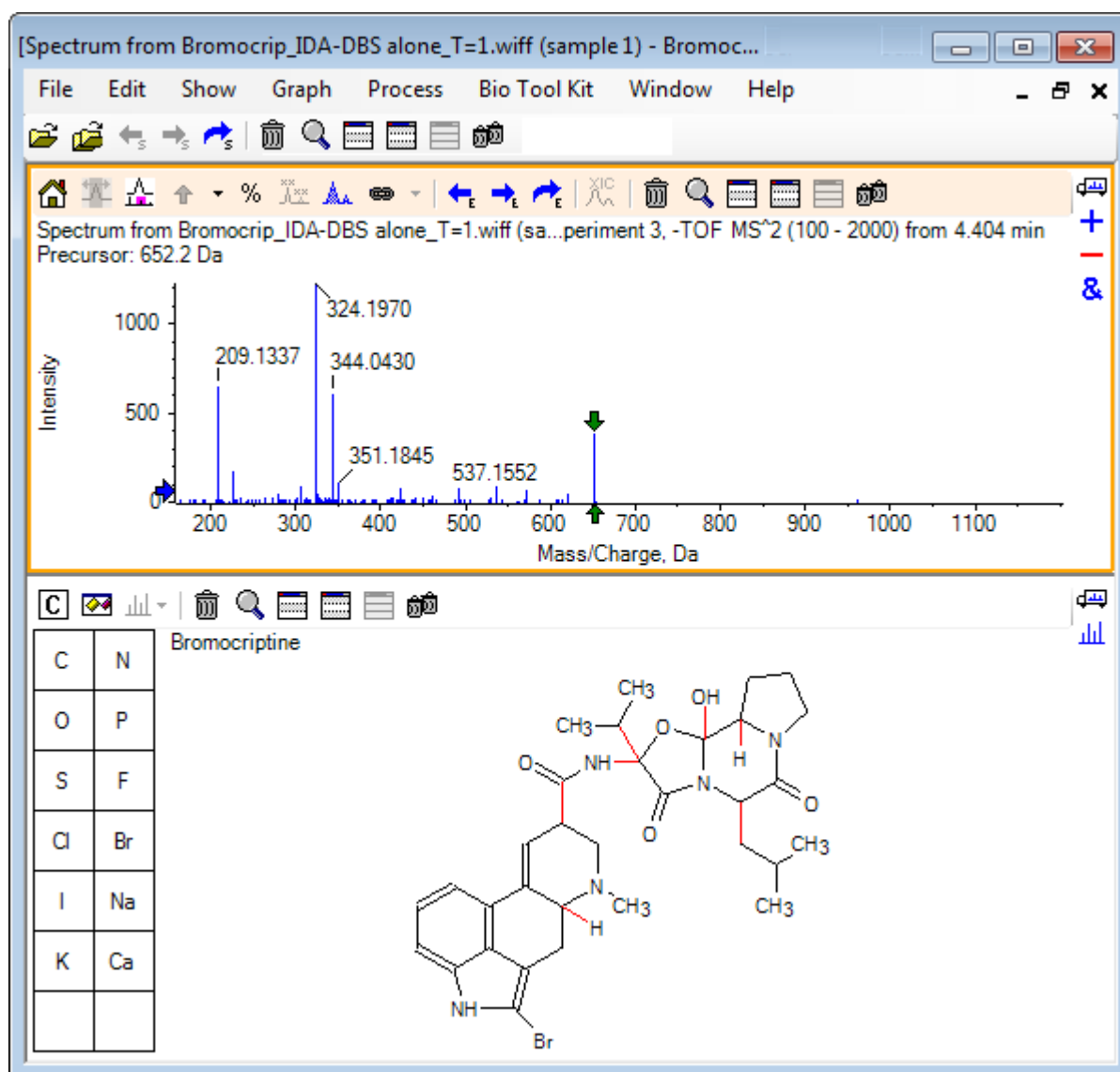
### Vincular uma estrutura a um espectro MS/MS

1. Localize o espectro MS/MS de bromocriptina, 652,2211/4,40. Consulte [Trabalhar com o explorador de IDA](#).

## Tutorial do Explorer

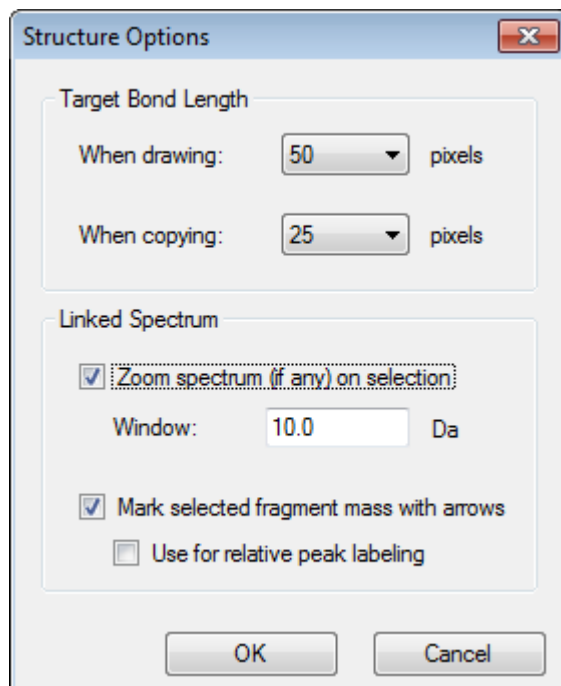
2. Clique no ícone **Ocultar todos os outros painéis** no gráfico de contornos para que somente o espectro fique visível.
3. Clique em **File > Open Mol File**.
4. Na caixa de diálogo **Select Mol File**, selecione o arquivo **Bromocriptine.mol** e depois clique em **Open**. Para mais informações sobre os locais de arquivos de dados instalados, consulte [Instituição](#).  
Um novo painel é aberto abaixo do espectro para mostrar a estrutura e as ferramentas.

**Figura D-45: Estrutura da bromocriptina**



5. Clique na caixa de diálogo **Show options** no painel da estrutura, garanta que as caixas **Zoom spectrum (if any) on selection** e **Mark selected fragments mass with arrows** estejam selecionadas e depois clique em **OK**. Os outros parâmetros podem ser deixados inalterados.

Figura D-46: Caixa de diálogo Structure Options



O espectro e a estrutura são automaticamente vinculados, porque o espectro estava ativo quando o painel de estrutura foi criado. Vincule manualmente a estrutura a um espectro arrastando o ícone **Exibir um espectro para seleção** ao espectro adequado.

Arrastar o painel da estrutura faz com que uma linha (laço) siga o cursor, permitindo que os usuários selecionem a estrutura total ou parcial, que é então representada em negrito. Como há um espectro vinculado, ele mostrará a região ao redor da massa da subestrutura selecionada.

- Desenhe um laço ao redor da molécula inteira e a visualização mudará para mostrar o pico  $m/z$  de 652,2177, que corresponde ao íon  $(M - H)^-$ .

Como a opção **Mark selected fragment mass with arrows** estava selecionada, uma seta vermelha é desenhada acima e abaixo do pico, indicando que essa é a massa esperada de um íon correspondente à região selecionada (ou seja,  $(M - H)^-$ , porque esses dados estão no modo negativo).

---

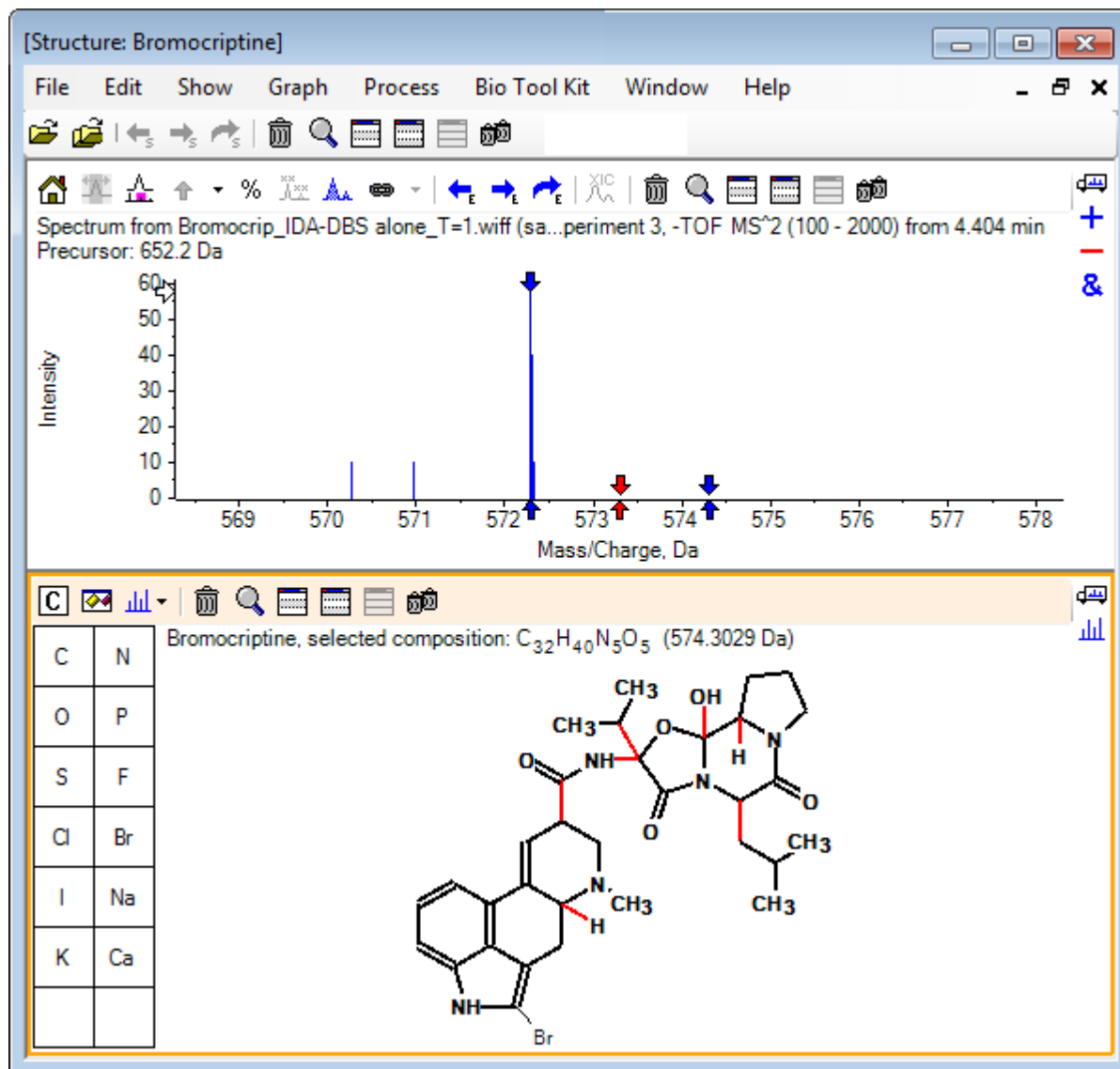
**Nota:** O título do painel da estrutura indica a composição elementar e a massa do componente neutro correspondente à seleção (ou seja,  $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$  com uma massa de 653,2213 Da).

---

Se **Mark selected fragment mass with arrows** estiver selecionado, uma seta verde será desenhada no pico 652,2177 quando nada estiver selecionado no painel de estrutura. Isso acontece porque a seta verde marca o complemento da seleção atual e sem a seleção o complemento é a molécula inteira.

- Selecione a molécula inteira, exceto o átomo de bromo. Consulte a [Figura D-47](#).

Figura D-47: Estrutura da bromocriptina



**Nota:** O átomo de bromo é o único em fonte normal, e o título no painel de estrutura mostra a composição C<sub>32</sub>H<sub>40</sub>N<sub>5</sub>O<sub>5</sub> com uma massa de 574,3029 Da. No espectro, a seta vermelha indica a massa esperada da seleção, ou seja, a massa do íon molecular (M – H)<sup>-</sup> menos a massa do bromo, e existem setas a 1 Da de distância em cada lado. É comum que os átomos adicionais de hidrogênio sejam ganhos ou perdidos durante a fragmentação e o software indica essa possibilidade desenhando um par de setas azuis em +1 e -1 para cada ligação quebrada. Nesse caso, somente uma ligação foi quebrada, então existem apenas duas setas adicionais.

O pico real no espectro corresponde a uma dessas setas, indicando que um átomo de hidrogênio foi perdido, ou seja, HBr, então, a massa do íon corresponde a (M – H – HBr)<sup>-</sup>.

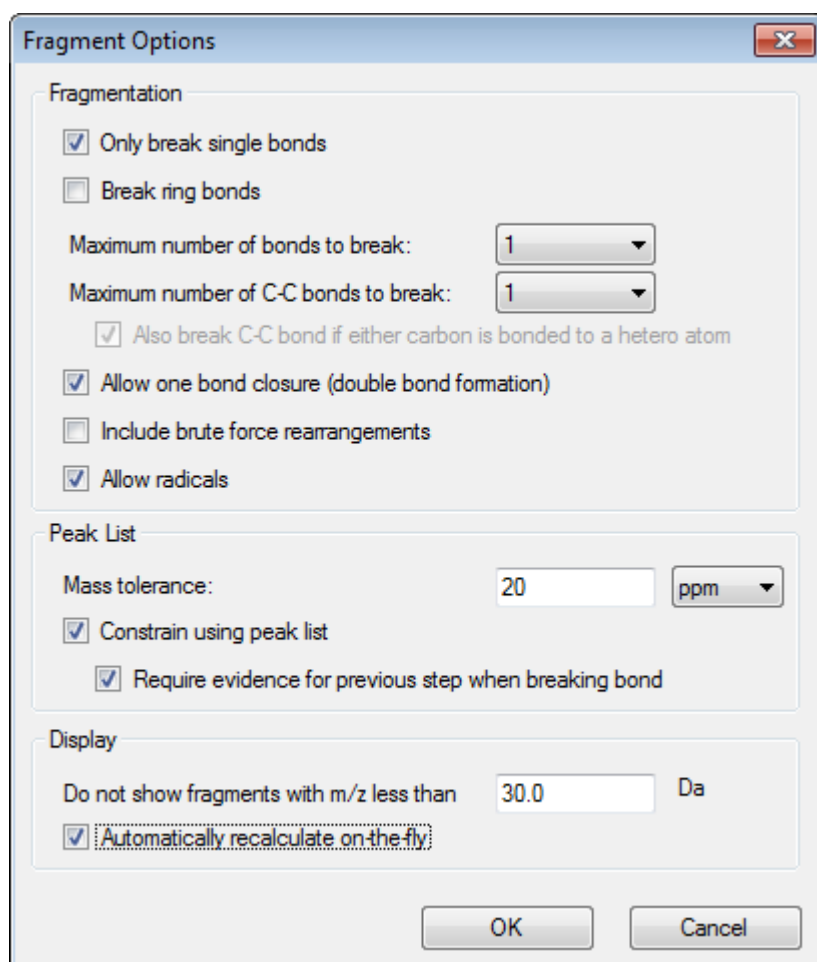
## Trabalhar com fragmentos

O software contém um preditor de fragmentos que pode gerar a massa de espécies formada por quebras de ligações e incluindo ou removendo átomos de hidrogênio.

**Nota:** Essa previsão é puramente aritmética, não usa lógica química e tende a superestimar os fragmentos produzidos, mas é uma ferramenta útil para analisar fragmentos.

1. Com a estrutura do painel ativa, clique em **Show > Fragments Pane**. Uma barra de progresso pode ser mostrada, dependendo das configurações na caixa de diálogo **Fragment Options**. Consulte a [Figura D-48](#).
2. Clique no ícone **Mostrar caixa de diálogo de opções**, configure os parâmetros conforme mostrado em [Figura D-48](#), e clique em **OK**.

**Figura D-48: Caixa de diálogo Fragment Options**



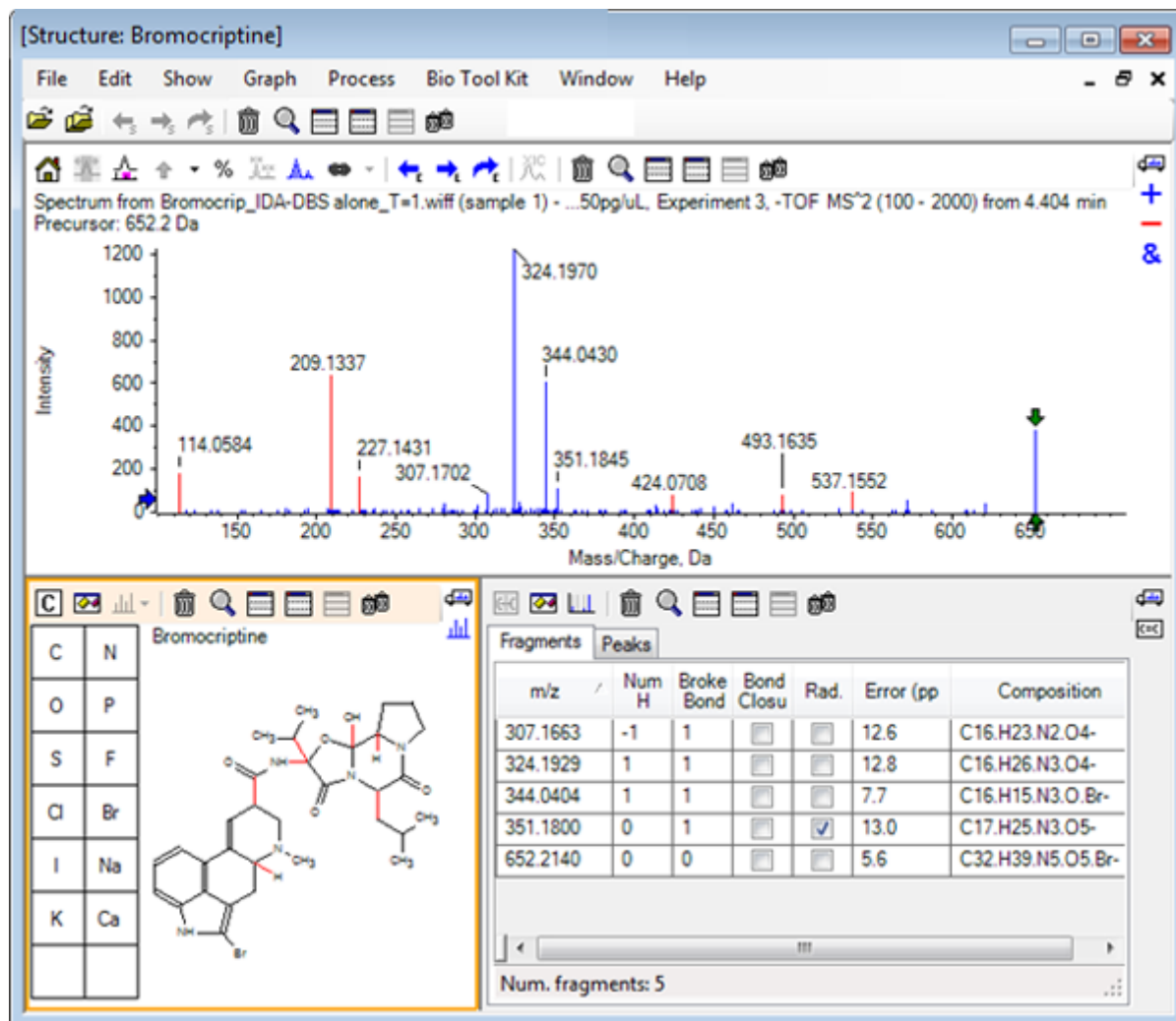
Configure as opções para que um conjunto pequeno de fragmentos simples seja produzido e depois aumente o número e tipo de ligações quebradas, conforme necessário, para explicar os íons observados. Permitir que várias ligações se quebrem causa lentidão no programa e gera um número maior de fragmentos improváveis.

A maioria dos parâmetros na caixa de diálogo **Fragment Options** está descrita no *Guia de referência*, mas deve ser observado o seguinte:

- Se a opção **Automatically recalculate on-the-fly** estiver selecionada, quaisquer mudanças no espectro (alteração para um diferente ajuste de parâmetros) ou seleção faz com que os fragmentos sejam recalculados. Esse geralmente é o comportamento desejado, mas pode ter impacto na velocidade da análise se as opções estiverem configuradas para produzir vários fragmentos. Se essa opção não for utilizada, clique no ícone **Fragmento**.
- **Constrain using peak list** significa que o software mostrará somente os fragmentos que correspondem aos picos no espectro com a tolerância adequada.
- **Require evidence for previous step when breaking bond** somente é eficaz quando mais de uma ligação é quebrada. Primeiro, o programa quebra uma ligação e depois considera quebrar ligações nas partes resultantes. Se essa opção estiver selecionada, devem existir íons correspondentes às partes antes de serem quebradas mais vezes.

Com esses parâmetros, a visualização deve lembrar a [Figura D-49](#), mas deve ser levemente diferente, porque somente os picos acima da configuração do limite (também rotulada) são considerados.

Figura D-49: Estrutura da bromocriptina



**Nota:** Os picos no espectro são coloridos para indicar os designados (azul) e os não designados (vermelho) correspondentes aos picos na aba Fragmentos.

O painel de fragmentos contém duas guias:

- **Fragments:** neste exemplo, a lista é curta, porque não são gerados muitos fragmentos sob essa condição, e somente alguns deles correspondem aos picos no espectro, conforme necessário, porque a caixa de seleção **Constrain using peak list** foi selecionada.
- **Peaks:** mostra uma tabela listando os picos no espectro que estão acima do limite, suas intensidades, e se foram designados a um fragmento. Para picos designados também é mostrado um erro de massa.

Figura D-50: Painel de fragmentos

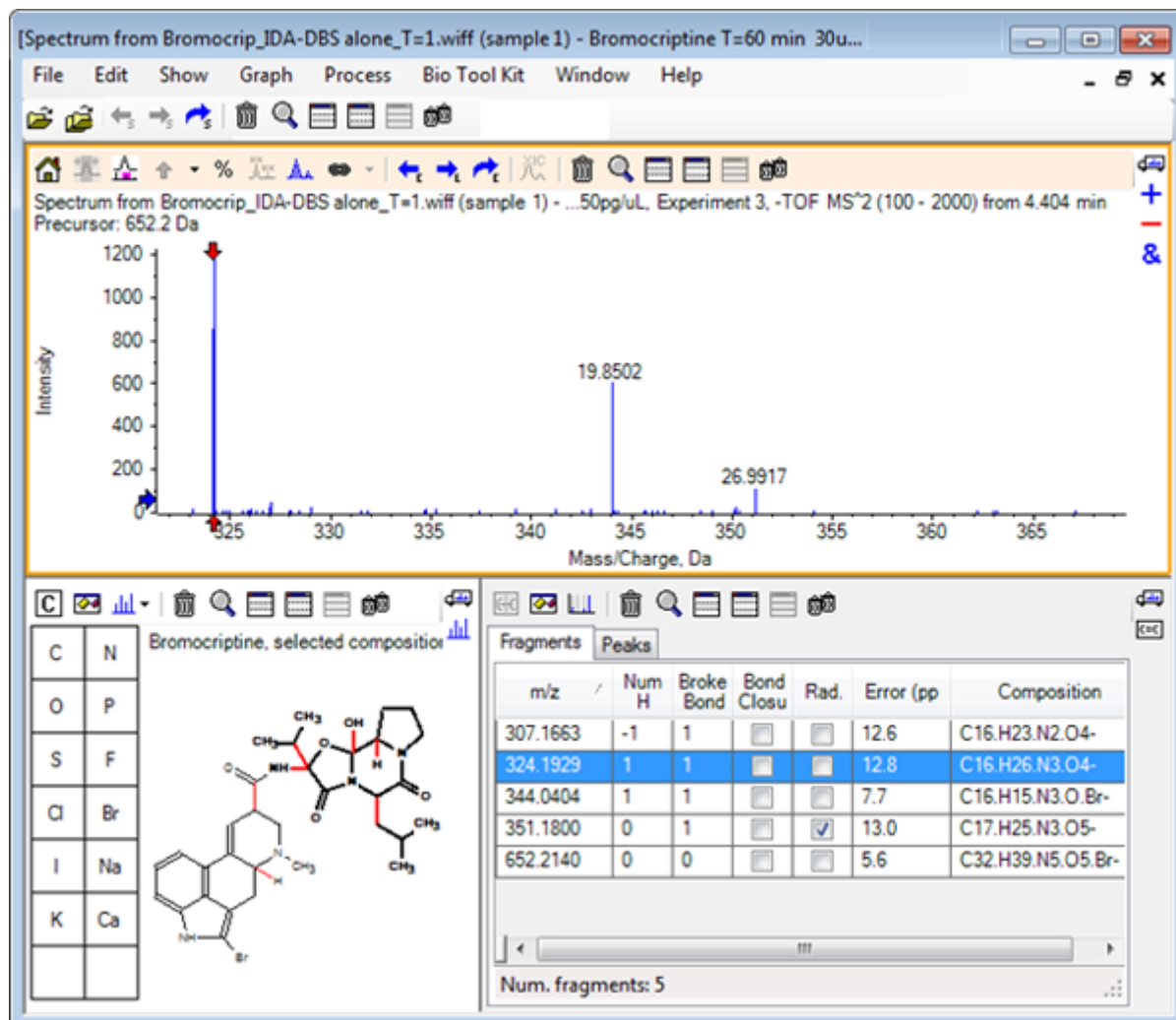
Mass/Charge	Intensity (%)	Assign	Error (ppm)	Radica
114.0584	14.88	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
209.1337	52.33	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
227.1431	13.74	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
307.1702	7.20	<input checked="" type="checkbox"/>	12.6	<input type="checkbox"/>
324.1970	100.00	<input checked="" type="checkbox"/>	12.8	<input type="checkbox"/>
344.0430	49.22	<input checked="" type="checkbox"/>	7.7	<input type="checkbox"/>
351.1845	9.08	<input checked="" type="checkbox"/>	13.0	<input checked="" type="checkbox"/>
424.0708	6.62	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>

Matches: 5 of 11 peaks, 66.0% of total intensity

3. Na aba **Fragments**, selecione uma linha para uma faixa de  $m/z$  de 324,1929. O pico é marcado com uma seta vermelha para mostrar que essa é a massa esperada e a subestrutura correspondente é demonstrada em negrito no painel de estrutura.



Figura D-51: Caixa de diálogo de fragmentação



**Nota:** A composição e a massa no título do painel de estrutura agora refletem a massa do íon, em vez da massa neutra.

- Examine as estruturas designadas aos outros fragmentos.

Todas elas estão relacionadas à ligação da amida central que separa as duas partes cíclicas da molécula e parecem possíveis.

**Nota:** As composições elementares designadas são consistentes com os espectros sobrepostos que foram gerados no [Usar um espectro de referência](#), nos quais a presença de Br em fragmentos foi deduzida ao comparar os espectros de íons moleculares que contêm <sup>79</sup>Br e <sup>81</sup>Br.

- Aumente o zoom do espectro para toda a faixa de massas fique visível. Dois dos maiores picos estão designados, uma  $m/z$  de 324,1970 e uma  $m/z$  de 344,0430, correspondentes aos dois lados da molécula, e estão representados em azul. No entanto, existem vários picos que ainda não estão designados.

6. Abra a caixa de diálogo **Options** e depois altere o **Maximum number of bonds to break** para **2**.

---

**Nota:** Dependendo da configuração de limite, essa opção pode fazer com que alguns picos pequenos sejam assimilados, mas não os mais abundantes (de  $m/z$  em 114,0584, 209,1337 e 227,1431, por exemplo). Se o espectro estiver rotulado em relação a uma seta vermelha, clique no painel de estrutura para limpar qualquer seleção para mostrar os valores de massa absoluta.

---

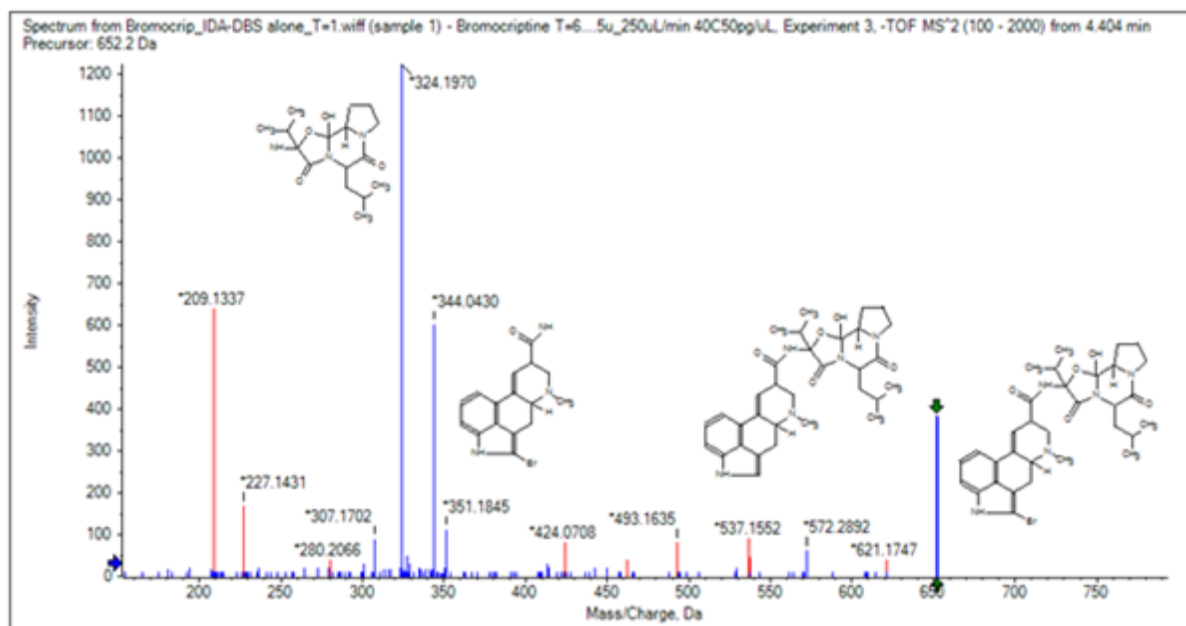
7. Marque a opção **Break ring bonds** e depois clique em **OK**. Diversos íons adicionais agora são assimilados, incluindo aqueles em  $m/z$  de 209,1337 e 227,1431. Selecione as novas massas no painel **Fragments** para realçar as subestruturas e mostra que elas estão relacionadas a clivagens do anel na parte do peptídeo cíclico da molécula. Esses íons provavelmente serão úteis para determinar os locais de transformação metabólica nessa região.

## Incluir subestruturas em um espectro

Selecione partes da estrutura e as utilize para anotar o espectro para referência futura. Dependendo do tamanho do painel de espectro, use a caixa de diálogo **Options** no painel de estrutura para ajudar o **Target Bond Length** para copiar.

1. Na caixa de diálogo **Fragment Options**, desmarque a opção **Break ring bonds** para simplificar o número de fragmentos.
2. No painel de fragmentos, selecione uma linha correspondente a um ou mais íons abundantes para destacar a estrutura correspondente.
3. Clique dentro do painel de estrutura.
4. Clique em **Edit > Copy**.
5. Clique com o botão direito em um painel com espectro ativo e depois clique em **Paste Image**. Isso faz com que uma imagem da subestrutura seja colada no painel do espectro.
6. Mova a imagem arrastando-a para o local desejado. Uma imagem pode ser excluída totalmente clicando com o botão direito e depois selecionando **Delete Image**. As imagens são vinculadas ao espectro, ou seja, às posições de intensidade da massa, portanto, elas se movem à medida que o usuário rola ou dá zoom.
7. Repita as etapas 2 a 6 para que outros fragmentos gerem uma imagem final semelhante à [Figura D-52](#).

Figura D-52: Espectro com subestruturas incluídas



- Clique em **File > Print > Print Preview Window** para verificar o posicionamento das subestruturas.  
Como os íons assimilados são representados em azul, eles são fáceis de se associar às estruturas correspondentes.
- Copie a imagem e depois a cole em um programa de desenho para incluir linhas ou outros recursos.

## Trabalhar com espectros de MS/MS relacionados

Em algumas aplicações, é útil poder comparar o espectro de um composto modificado, um metabólito, por exemplo, ao espectro e estrutura do composto precursor.

- Use o explorador IDA para mostrar o gráfico de contorno novamente. Selecione o pico em 668,2176/4,21 e depois oculte o Gráfico de contorno.

Como os painéis de estrutura e de fragmentos estão vinculados ao espectro, eles foram atualizados para refletir o novo espectro, mas a estrutura ainda é a mesma do composto precursor, enquanto o espectro foi obtido de um composto com um átomo de oxigênio adicional (16 Da a mais na massa). Em muitos casos ainda existem algumas assimilações, indicando as partes da molécula que não foram alteradas, mas nesse caso, nenhuma assimilação significativa de íons foi representada em vermelho.

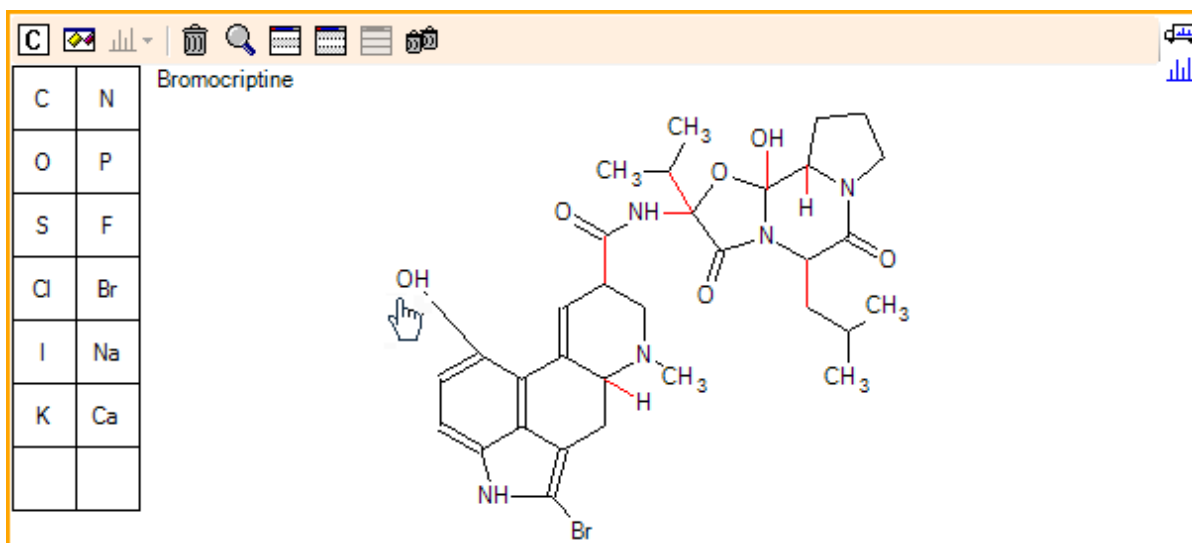
O painel de estrutura contém ferramentas de desenho mais simples que permitem modificações na estrutura para ver se podem ser encontradas novas assimilações.

- O lado esquerdo do painel de estrutura contém uma grade com símbolos dos elementos. Clique no **O** e arraste-o em direção à estrutura principal  
Quando o átomo estiver perto da estrutura, ele é conectado por uma ligação que segue o cursor à medida que é arrastado próximo da estrutura.

## Tutorial do Explorer

3. Arraste o símbolo **O** para que uma ligação seja desenhada na parte inferior da estrutura (ergolina) e solte o mouse (por exemplo, coloque o novo átomo no anel de fenil). A [Figura D-53](#) mostra este processo.

**Figura D-53: Painel de estrutura**

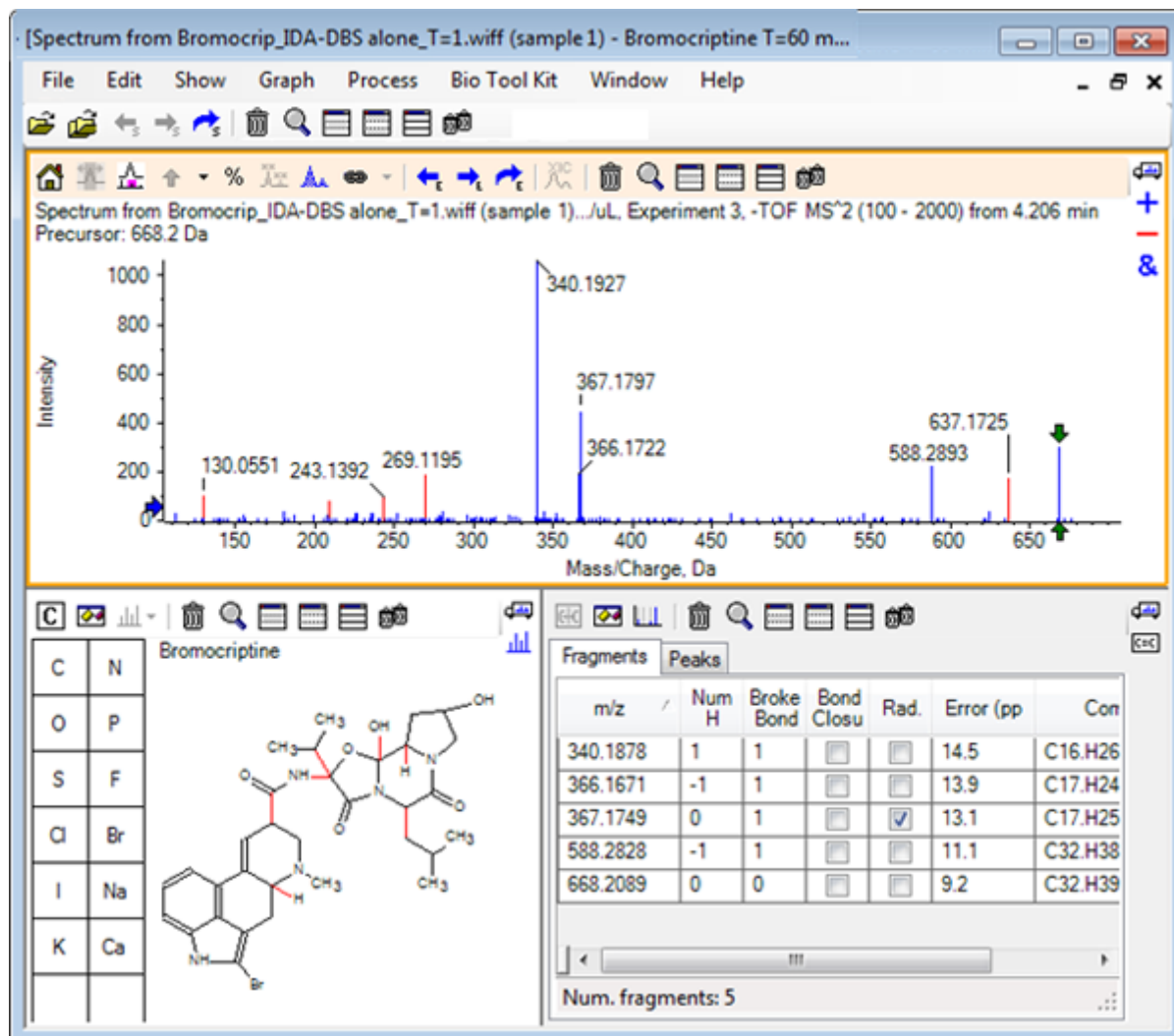


O espectro é atualizado novamente e mostra duas assimilações: o íon molecular em 668,2089 e o íon correspondente à perda de HBr em 588,2828. Isso sugere que a composição elementar está correta agora, mas o fato de que os fragmentos maiores não são identificados sugere que o átomo não foi adicionado à parte correta da molécula.

4. Clique no grupo **OH** recém adicionado e depois arraste-o para o anel de pirrolidina na parte superior da estrutura. Garanta que o único átomo sendo movido esteja destacado em negrito. Caso contrário, a estrutura inteira destacada será movida.

Conforme mostrado na [Figura D-54](#), isso faz com que os íons em 340,1927, 366,1722 e 367,1797 correspondam as subestruturas nas formas hidroxiladas de íons assimilados no espectro do composto precursor.

Figura D-54: Espectro de bromocriptina



Vários dos picos de massa baixa não correspondidos estavam presentes no espectro precursor, ou são equivalentes hidroxilados que foram assimilados quando o algoritmo permitiu quebrar ligações do anel, mas existe um íon de massa alta em 637,1725 que provavelmente é devido a uma etapa de fragmentação simples e ainda não foi assimilado.

- Na aba **Fragments**, selecione a linha para 668,2089 para que ela seja rotulada e os outros íons sejam rotulados em relação à ela. Isso mostra que o pico em 637,1725 corresponde à perda de massa de 31,0364 da molécula precursora, que poderia ser  $\text{CH}_3\text{NH}_2$  ou  $\text{CH}_3\text{O}$ . Como esse íon não foi observado no espectro da molécula precursora, parece mais provável que seja derivado da hidroxilação que ocorre em um dos grupos metil na parte de peptídeo cíclico da estrutura.
- Clique duas vezes no painel de estrutura para desmarcar a seleção da estrutura e depois arraste o novo grupo **OH** para um dos grupos metil à direita da estrutura.

## Tutorial do Explorer

---

7. Abra a caixa de diálogo **Fragment Options**, configure a **Mass tolerance** em 30 ppm e depois clique em **OK**.  
O íon 637 agora é assimilado e selecionar essa linha no painel de fragmentos mostra que o íon pode corresponder à perda de uma fração metóxi.
8. Abra a caixa de diálogo **Fragment Options**, selecione a opção **Break ring bonds** e depois clique em **OK**.  
A maioria dos fragmentos agora podem ser assimilados, embora o íon em 209 só possa ser correspondido se as três quebras de ligações forem permitidas (as duas necessárias da molécula precursora mais a perda do átomo de oxigênio adicional).

---

**Nota:** O painel de fragmentos agora contém várias linhas para algumas das massas, como 637, 1905. Cada uma dessas linhas corresponde a um possível fragmento diferente (e mais ainda: são gerados se as três ligações puderem ser quebradas). A aba Picos, no painel de fragmentos, somente mostra a identificação que deve ser a melhor com base em uma combinação da precisão da massa, o número de ligações quebradas, se o fragmento é um radical e assim por diante. Nesse caso, a melhor identificação é de um fragmento que poderia ter sido gerado pelo composto precursor, mas não foi observado, então, as opções adicionais mostrada na aba Fragments podem ser úteis na sugestão de potenciais vias que não são óbvias.

---

## Resumo

Nesta seção, as seguintes tarefas foram discutidas:

- Incluir uma estrutura como um arquivo .mol e depois vinculá-lo a um espectro.
- Selecionar partes da estrutura e depois determinar se há um pico de massa correspondente.
- Gerar um painel de fragmentos e depois configurar os parâmetros para observar fragmentos simples.
- Trabalhar com as abas **Fragments** e **Peaks** para mostrar composições correspondentes, estruturas e picos de massa.
- Modificar as **Fragment Options** para permitir vias de fragmentação mais complexas.
- Incluir subestruturas a um painel de espectro.
- Modificar a estrutura para explorar a fragmentação de moléculas relacionadas, como metabólitos.

Em geral, é uma boa prática começar permitindo processos de fragmentação simples e opções de fragmentação adicionais (ligações adicionais, ligações em anel) conforme necessário, para explicar os íons observados. Isso é consistente com o fato de que fragmentos são gerados por uma série de etapas, com os fragmentos mais simples sendo formados primeiro, ao invés de em uma etapa combinada que quebra várias ligações. Claro que um fragmento simples pode ser instável e fragmentar imediatamente ainda mais, então, isso não será observado. Além disso, permitir um grande número de etapas de fragmentação requer mais tempo de processamento e leva mais tempo para terminar.

Ao comparar moléculas relacionadas, pode ser útil sobrepor o espectro de referência (molécula precursora) e a forma modificada e depois vincular a visualização a um painel

de estrutura ou de fragmentos, que é atualizado à medida que o espectro ativo é trocado. No entanto, as cores aplicadas aos íons identificados e não assimilados podem dificultar a distinção se houver sobreposições, então, é recomendado trabalhar com um único espectro até obter familiaridade com o programa e com as visualizações.

## Trabalhar com várias amostras

Embora seja comum trabalhar com apenas uma amostra, existem ocasiões em que informações adicionais podem ser obtidas ao comparar e visualizar várias ao mesmo tempo. Essa seção ilustra algumas das ferramentas disponíveis no software, primeiro para duas amostras e depois para várias amostras.

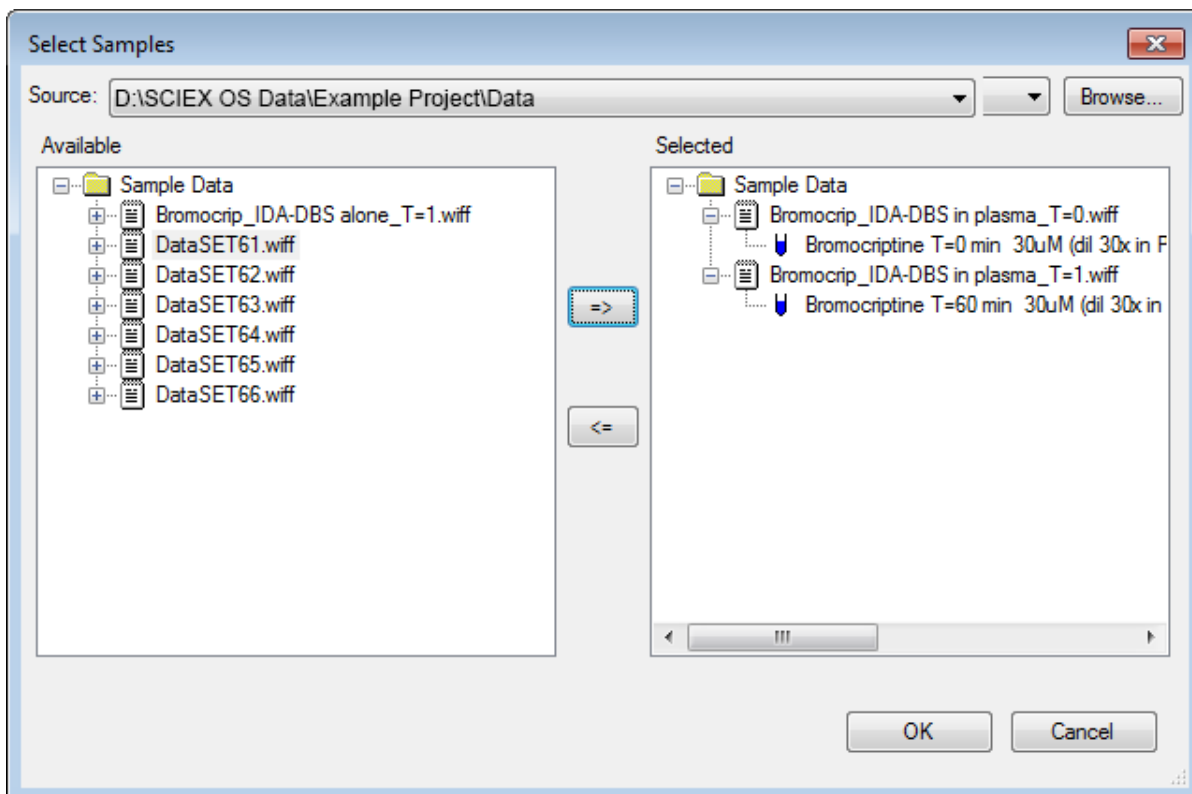
### Trabalhar com duas amostras

Um fluxo de trabalho comum é comparar duas amostras obtidas sob diferentes condições para determinar as alterações. Por exemplo, dois momentos diferentes depois da administração de um medicamento farmacêutico. Os dados sendo comparados nesse exercício (T = 0 hora e T = 1 hora) são de uma incubação de bromocriptina com microssomas de fígado de rato enriquecidas em plasma.

Feche todas as janelas abertas antes de iniciar.

1. Clique em **File > Open Multiple Samples**, e depois navegue até a pasta contendo os dados da amostra.
2. Selecione os arquivos **Bromocrip\_IDA-DBS em plasma\_T=0.wiff** e **Bromocrip\_IDA-DBS em plasma\_T=1.wiff**
3. Clique em **OK**.

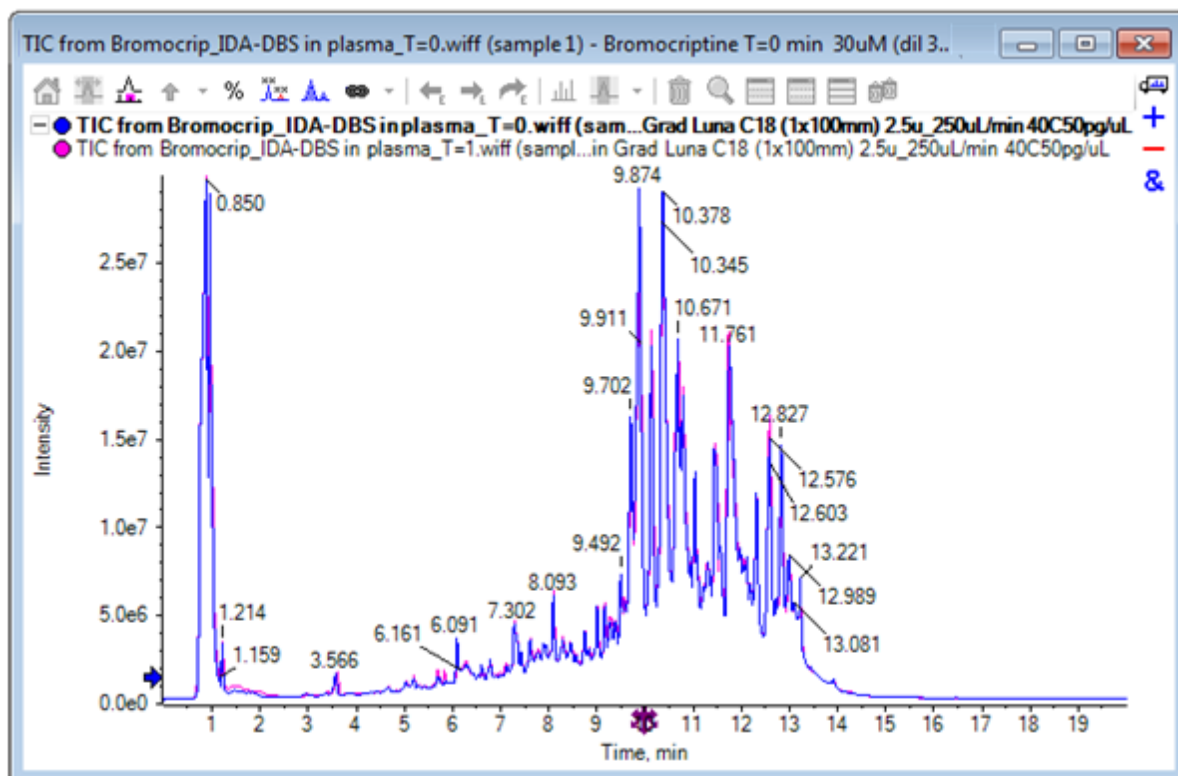
**Figura D-55: Selecione várias amostras.**



Ao contrário de abrir um único arquivo IDA, no qual TICs separados são mostrados para a análise e varreduras dependentes, com vários arquivos IDA, um único TIC de todos os dados é mostrado para todas as amostras. Neste caso, existem dois TICs, como mostrado na [Figura D-56](#)

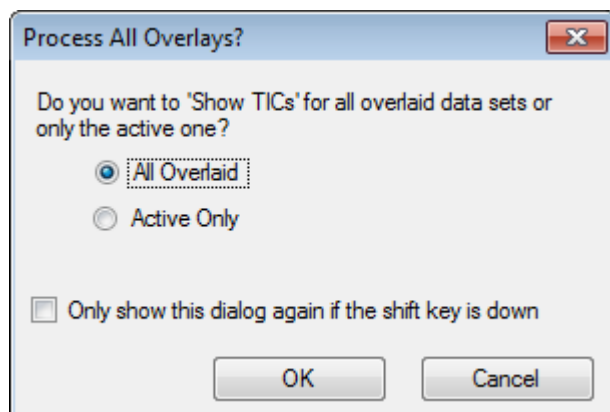


Figura D-56: TICs



4. Clique em **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** para abrir a caixa de diálogo **Select Experiment**.
5. Selecione **Period 1, Experiment 1 - TOF MS (100 - 2000)** e depois clique em **OK**.

Figura D-57: Caixa de diálogo Process All Overlays



A caixa de diálogo **Process All Overlays**, que é mostrado sempre que traços sobrepostos são processados, permite que usuários escolham se querem processar todos os traços ou somente o traço ativo. Processar todos os traços é útil porque as operações subsequentes afetam todos os traços (amostras).

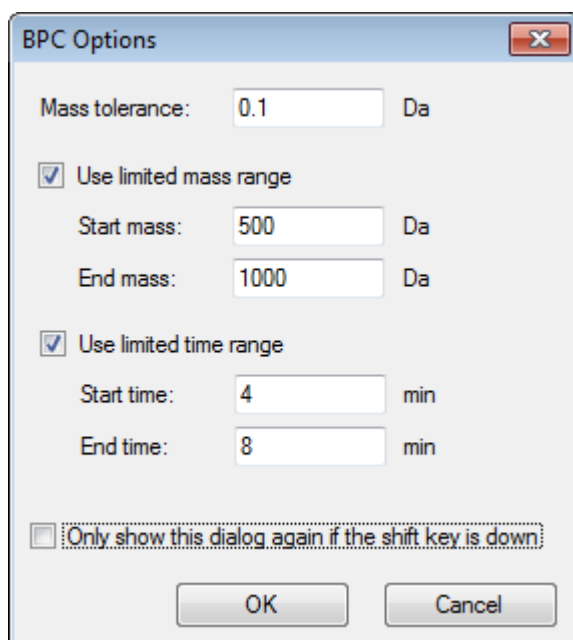
6. Selecione **All Overlaid**.

## Tutorial do Explorer

---

7. Selecione a opção **Only show the dialog again if the shift key is down** para tornar essa escolha a ação padrão.
  8. Clique em **OK**.  
Isso gera um painel contendo sobreposições das TICs de pesquisa. A cromatografia é muito reprodutível, e os picos dos metabólitos, intensos. Alguns metabólitos, alguns podem ser melhor observados quando ampliados e quando se comparam os cromatogramas (examine a região em cerca de 6 min) mas, geralmente, é necessário trabalho adicional. Existem várias formas de gerar gráficos que são mais fáceis de comparar. Para este exemplo, é usado um cromatograma de pico de base.
- 
- Nota:** Se **File > Open Heat Map TICs from Wiff** estiver clicado, as visualizações de faixa podem ser geradas diretamente sem mostrar primeiro os cromatogramas sobrepostos.
- 
9. Oculte o painel do TIC original e depois clique em **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.
  10. Na caixa de diálogo **BPC Options**, modifique as configurações, conforme necessário, para corresponder aos valores na [Figura D-58](#) e depois clique em **OK**.

**Figura D-58: Caixa de diálogo BPC Options**



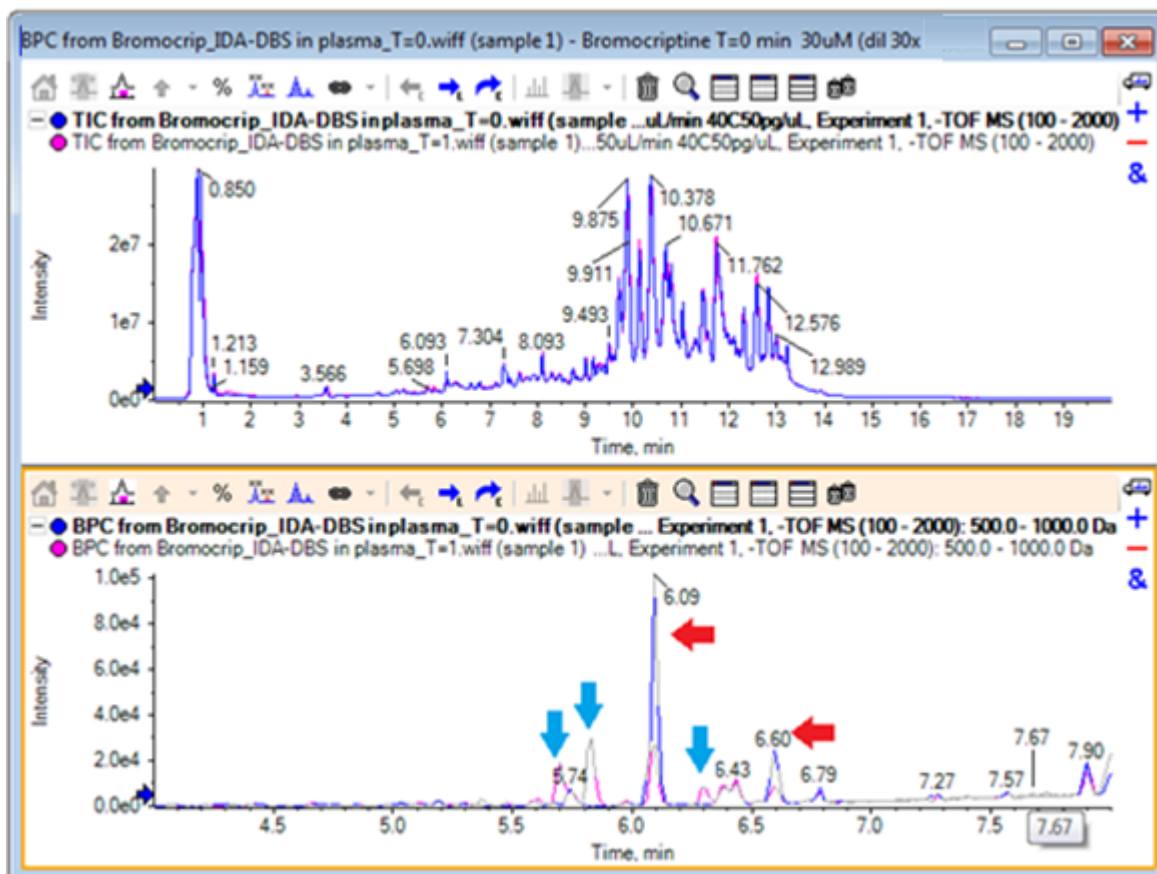
Um cromatograma de pico de base é construído e representado em gráfico a intensidade do maior pico em cada varredura como uma função do tempo de retenção. Para fornecer informações adicionais, cada traço alterna entre sua cor normal e cinza quando a massa do pico da base altera para mais do que a tolerância de massa especificada nessa caixa de diálogo.

Opcionalmente, é possível limitar a faixa de massa considerada, podendo evitar artefatos causados por picos da linha de base ruidosos por exemplo, e definir a faixa de tempo de retenção para acelerar o processamento. Como sabemos que a massa da

bromocriptina é aproximadamente 652, metabólitos simples não estaram abaixo de  $m/z$  de 500.

- Na caixa de diálogo **Process All Overlays**, certifique-se de que a opção **All Overlaid** está selecionada e depois clique em **OK**.  
Um novo painel mostra o BPC, que é muito mais simples e fácil de comparar do que os TICs originais.

Figura D-59: BPC



Existem dois picos (marcados com setas vermelhas) que parecem diminuir na amostra de 1 hora (linha de cor rosa) comparados à amostra T = 0 (linha azul). Esses picos correspondem à bromocriptina (6,09 min.) e um isômero. Também existem três picos (setas azuis) que estão presentes na amostra T = 1, mas não na amostra T = 0. Esses são potenciais metabólitos.

**Nota:** O BPC pode ser muito útil, mas ele apenas reflete o comportamento do íon mais intenso (no intervalo de massa escolhido). Os picos de massa que nunca se tornam os picos de base nunca podem ser mostrados, então, use outras ferramentas ao buscar diferenças entre as amostras.

- Oculte o painel TIC.
- Clique duas vezes no painel BPC em 6,09 min.

## Tutorial do Explorer

14. Selecione **All Overlaid** na caixa de diálogo **Process All Overlays** e depois clique em **OK**.

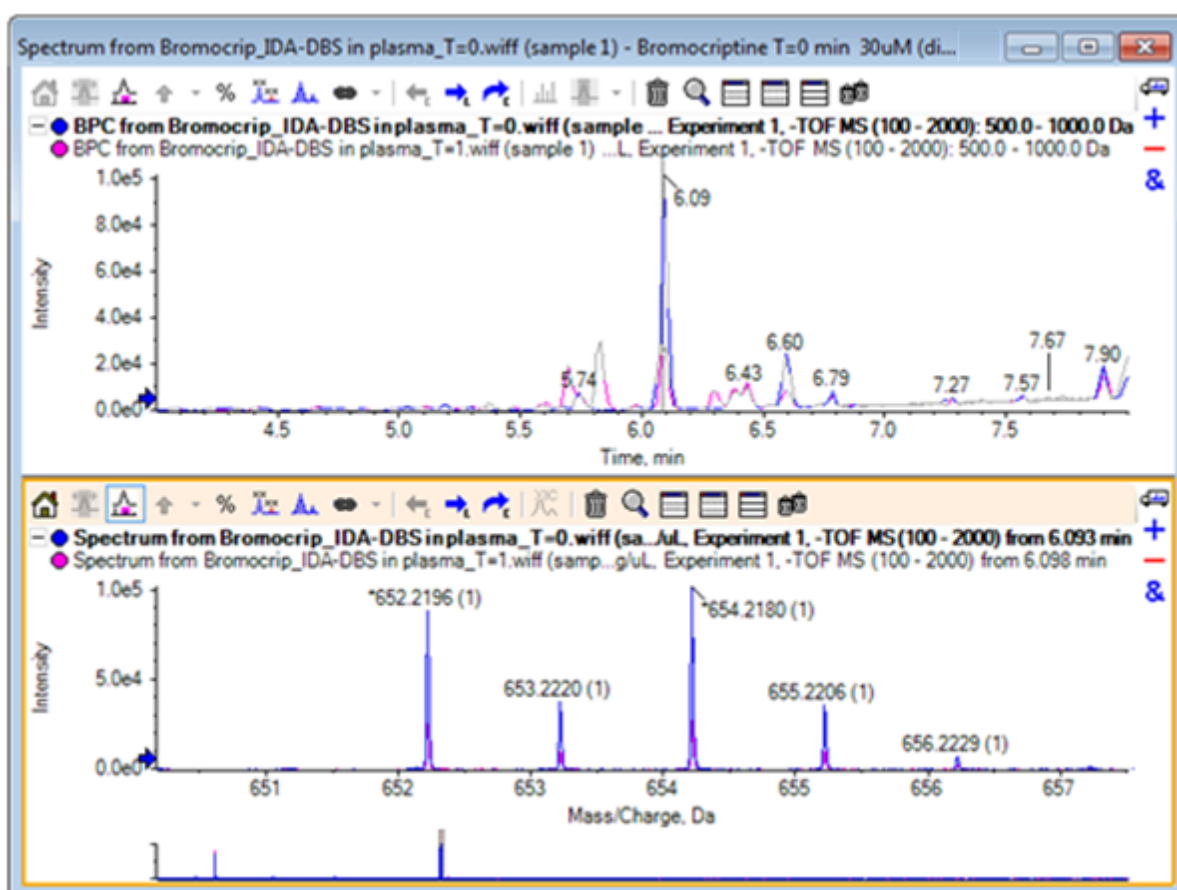
Isso gera dois espectros sobrepostos.

15. No painel de espectros, clique e depois dê zoom para mostrar o padrão isotópico em torno de  $m/z$  de 652. Consulte a [Figura D-60](#).

O painel do espectro contém os espectros sobrepostos de duas amostras, para que elas possam ser facilmente comparadas. Neste exemplo, fica claro que a intensidade na amostra T = 1 hora (rosa) é menor do que na amostra T = 0.

O gráfico de visualização geral é muito útil ao observar dados de alta resolução como esses, porque ele fornece uma maneira de ver os detalhes enquanto mantém todo o espectro visível.

**Figura D-60: Padrão isotópico observado em torno de  $m/z$  de 652.**



16. No painel Cromatograma, mova o cursor sobre a linha que mostra o tempo do espectro (anteriormente precisava de um clique duplo).
17. Quando o cursor mudar para uma seta dupla, arraste-o para o pico em aproximadamente 5,8 min.

O espectro continua a mostrar o intervalo de massa expandido, que agora somente possui ruído e pequenos picos. Para mostrar os picos rosa intensos na janela principal,

arraste o retângulo rosa no gráfico de visualização geral indicado por um seta preta abaixo. A visualização volta ao normal quando o mouse é solto.

Para a [Figura D-62](#), o ícone **Rótulo e traços sobrepostos** foi selecionado.

**Figura D-61: BPC e espectro**

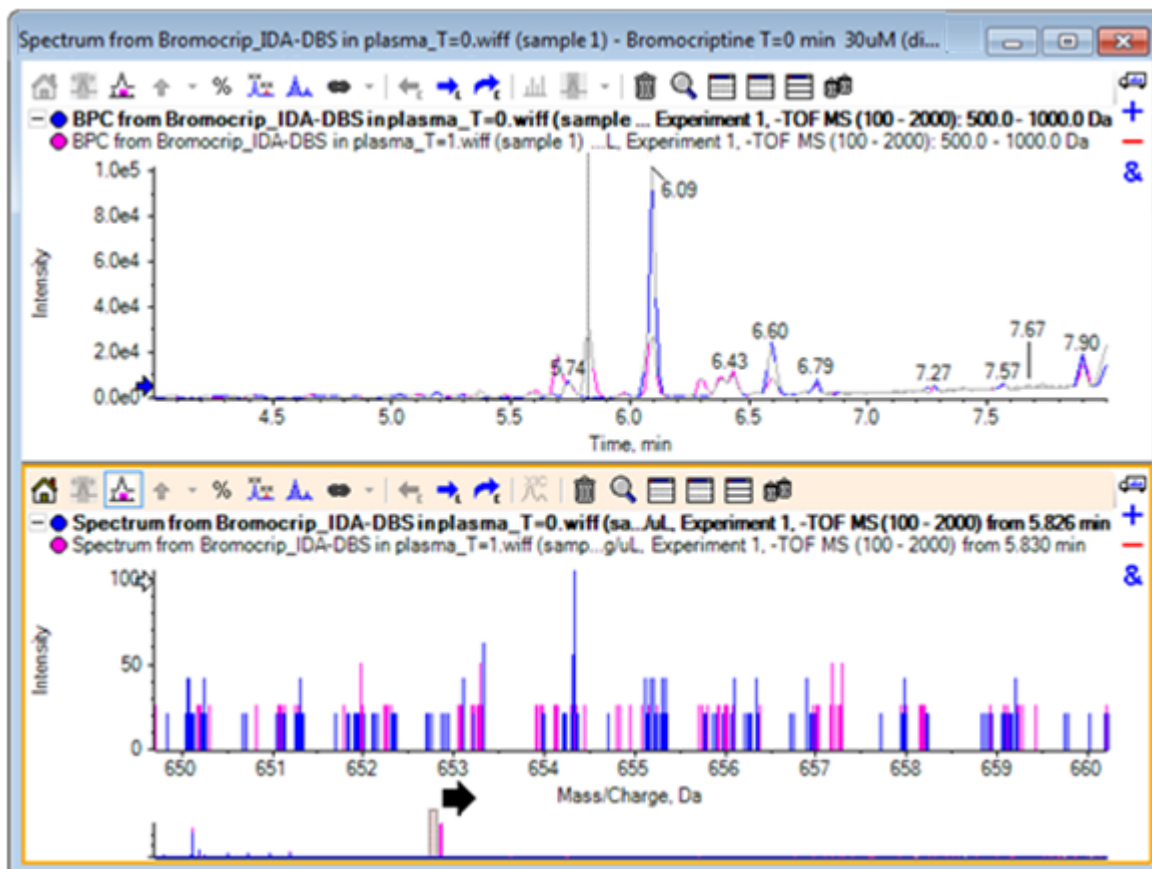
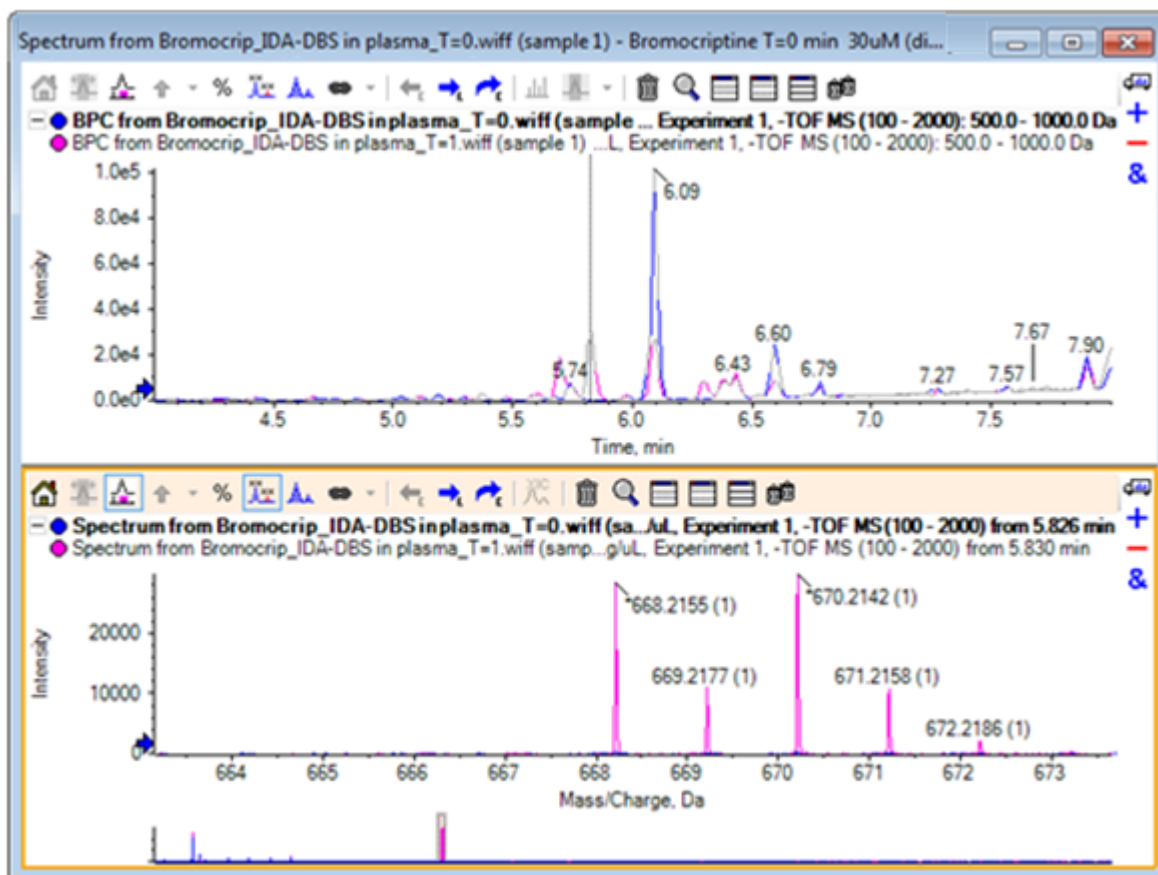


Figura D-62: Opção BPC e espectro com rótulo de todos os traços sobrepostos aplicada



Esses picos estão ausentes na amostra T = 0.

18. Feche todas as janelas abertas antes continuar.

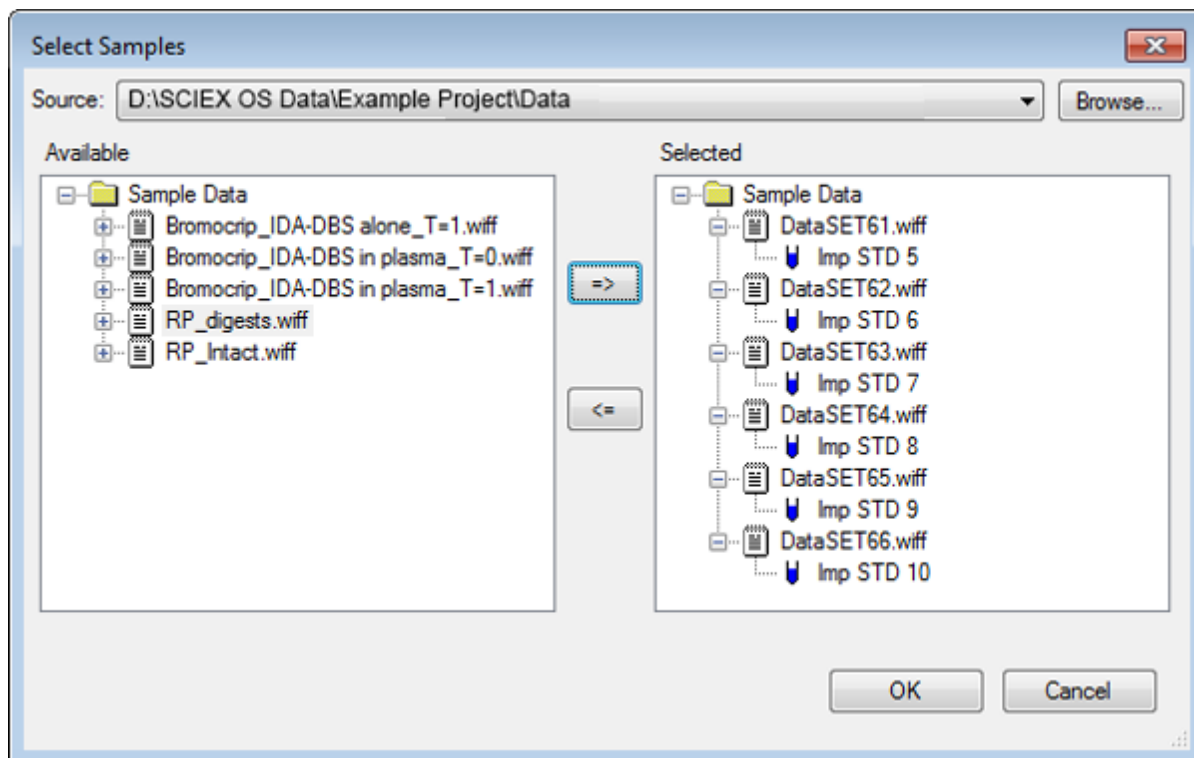
## Trabalhar com mais de duas amostras

Com mais de duas amostras sobrepostas, as janelas podem se tornar confusas e as diferenças mais difíceis de associar à amostra correta. O software contém outras ferramentas para ajudar a mostrar os dados de várias amostras.

O conjunto de dados usado para o exemplo é de uma análise de perfil de impureza de seis conjuntos de dados diferentes.

1. Clique em **File > Open Multiple Samples**.
2. Selecione os arquivos **DataSet61.wiff to DataSet66.wiff** e depois mova-os para o painel **Selected**.

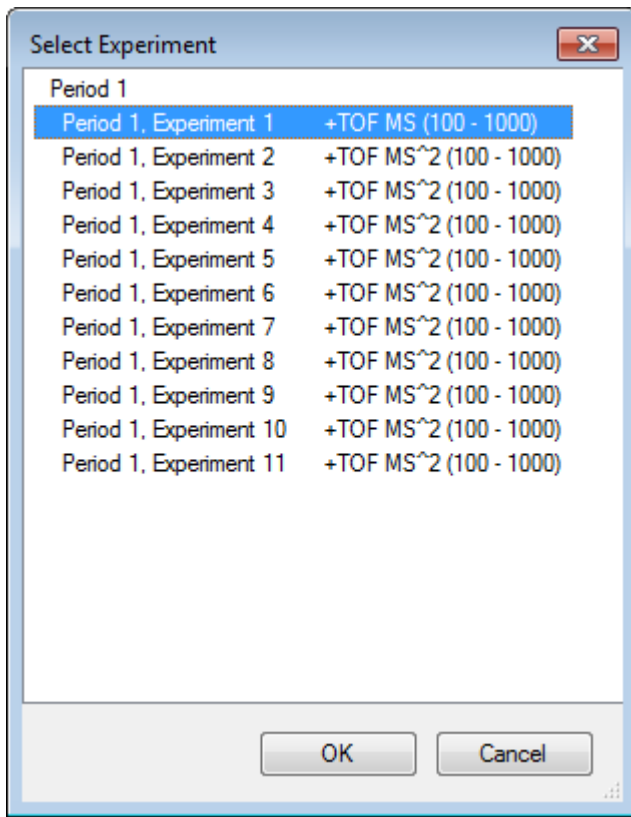
Figura D-63: Várias amostras selecionadas



3. Clique em **OK**.
4. Clique em **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
5. Selecione **Period 1, Experiment 1** da caixa de diálogo **Select Experiment**.



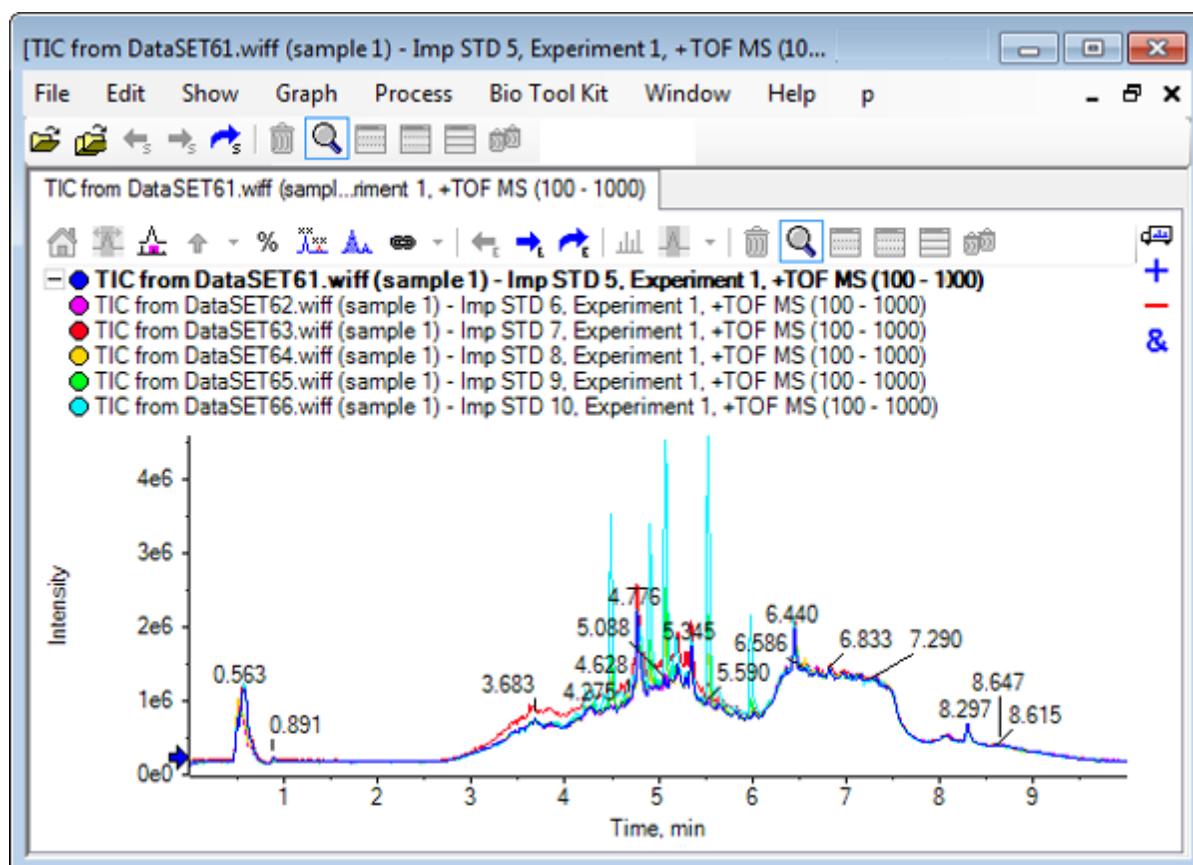
**Figura D-64: Caixa de diálogo Select Experiment**



6. Clique em **OK**.
7. Na caixa de diálogo **Process All Overlays**, selecione **All Overlaid** e depois clique em **OK**. O gráfico mostra a sobreposição de um cromatograma TIC para cada amostra no arquivo.



**Figura D-65: TICs sobrepostas do Experimento 1 do DataSet61.wiff até DataSet66.wiff**



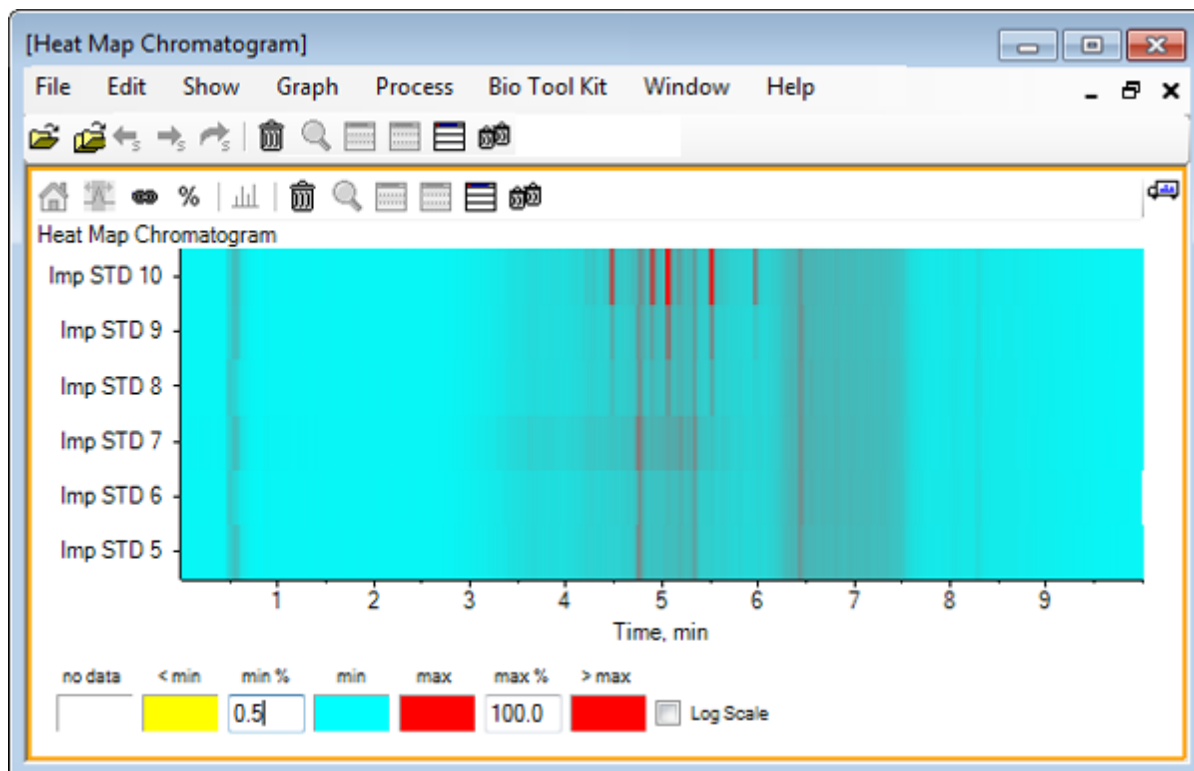
O título do traço ativo é mostrado em negrito. Clicar no ícone à esquerda desse título diminui os cabeçalhos a uma linha única, que fornece mais espaço para as informações.

8. Clique em **Show > Overlaid Traces as Heat Map** e, depois, no painel resultante, configure os controles de cor para que % mín. seja **0,5**, e % máx. seja **100**.

**Dica!** Clique com o botão direito e depois selecione **Show Appearance Control** se os controles não estiverem visíveis.

9. Clique dentro do painel do cromatograma e depois clique no ícone **Ocultar todos os outros painéis**.

Figura D-66: Cromatograma de mapa de calor



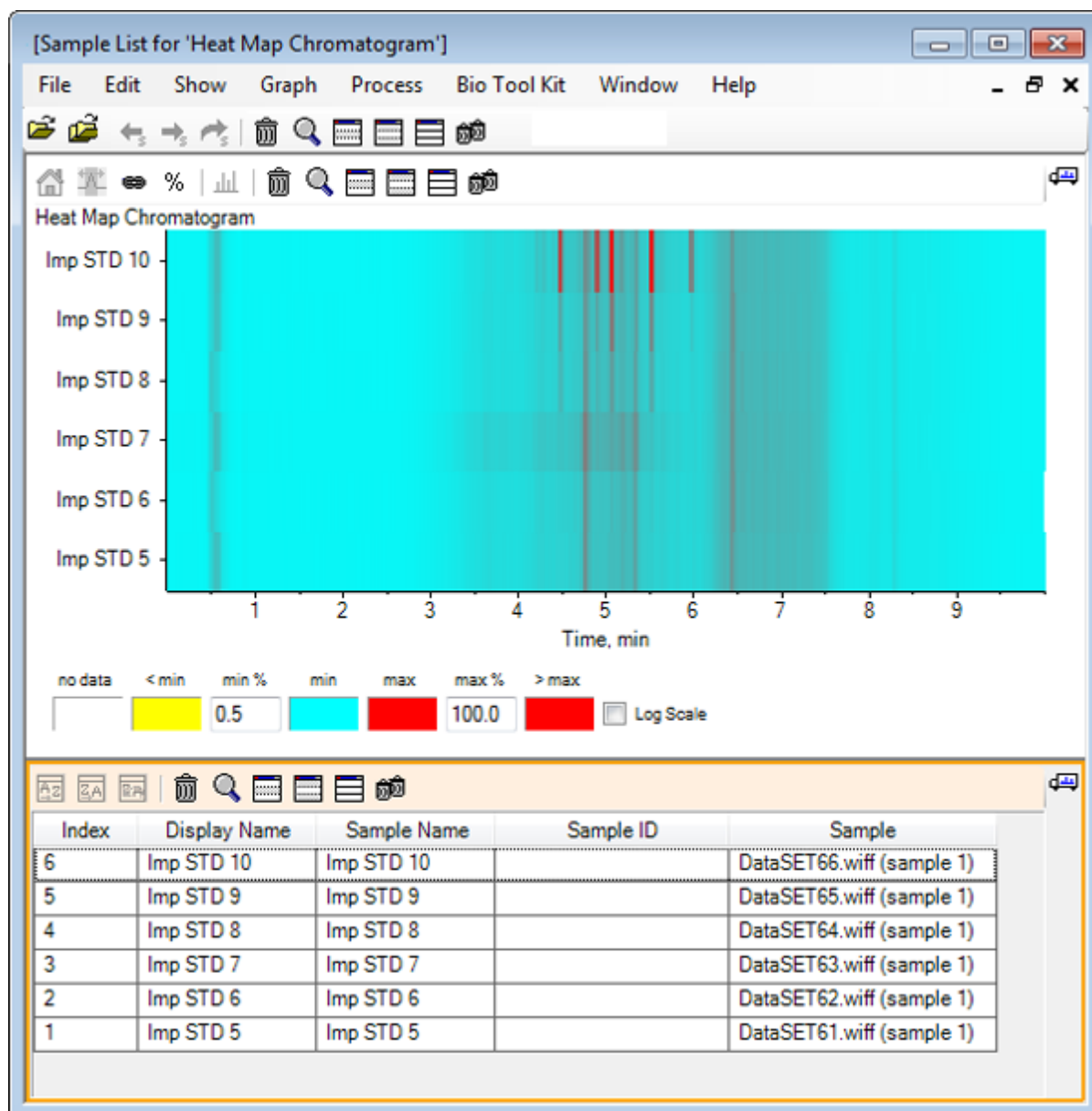
Cada amostra é representada por uma faixa horizontal única que mostra seu TIC, codificado por cor, de acordo com a intensidade. Usando o esquema de cores acima, o amarelo representa os pontos em que nenhum dado foi obtido ou em que a intensidade é menor do que 0,5% para em qualquer amostra, o azul representa 0,5% e o vermelho representa o sinal mais intenso.

A janela mostra de seis a sete picos (entre 4,5 min e 6,5 min) e que as respostas variam, exceto para o pico em 6,5 min.

A ordem dos picos é a mesma na qual as amostras foram adquiridas e talvez não seja o ideal. Neste exemplo, a ordem está adequada.

10. Clique com o botão direito no painel e depois clique em **Show Samples Table**. Inicialmente, a tabela de amostras é mostrada à direita do mapa de calor. O ícone **Arrastar e soltar para reorganizar os painéis** no canto superior direito do painel pode ser usado para arrastar o painel à parte inferior do mapa de calor para mover a tabela abaixo do painel original.

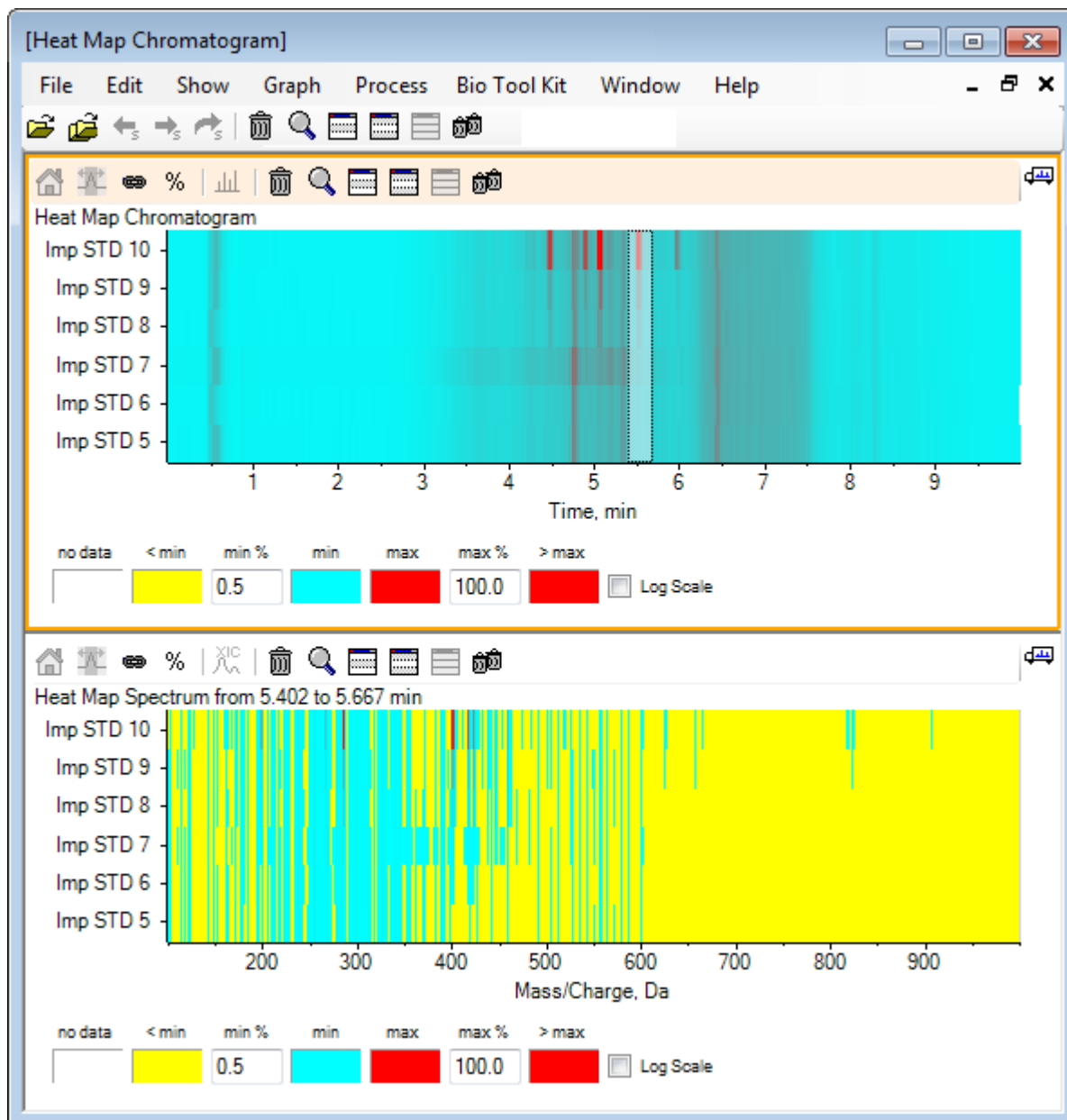
Figura D-67: Lista de amostras para o cromatograma do mapa de calor



A tabela contém colunas para os vários campos de texto associados a cada amostra. A coluna **Display Name** é editável, as outras são somente leitura. Todas as colunas podem ser usadas para organizar a tabela e a visualização da amostra.

11. Faça uma seleção no Imp STD 10 em torno de 5,5 min, depois clique duas vezes dentro dele.  
Um painel de Espectro de mapa de calor é gerado e a faixa de massa completa é mostrada no eixo x.

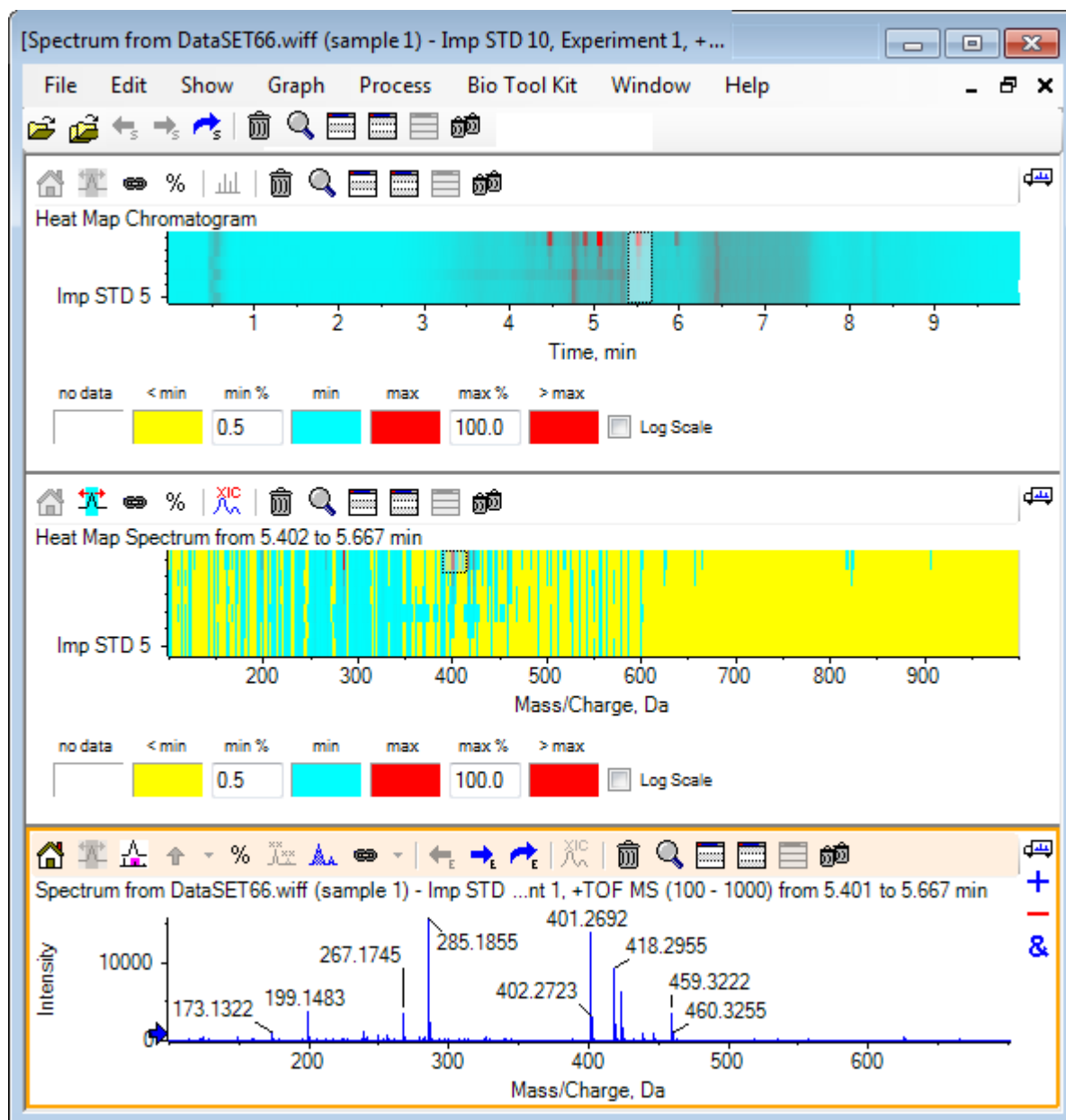
Figura D-68: Espectro do mapa de calor



Do espectro, pode-se determinar que duas massas (entre  $m/z$  de 400 e  $m/z$  de 460) contribuem para a maior intensidade na região de tempo selecionada.

12. Selecione a massa ao redor de 401 Da para a amostra Imp STD 10 e depois clique com o botão direito para selecionar **Show Spectra for Selected Samples**. Isso criará um espectro para essa amostra selecionada. O espectro neste momento é mostrado. Consulte a [Figura D-69](#).
13. Clique duas vezes na massa ao redor de 401 Da no espectro do mapa de calor para gerar um XIC do mapa de calor.

Figura D-69: Espectro



## Resumo

Nesta seção, as seguintes tarefas foram discutidas:

- Trabalhar com várias ferramentas de amostra disponíveis no software.
- Comparar duas amostras com cromatogramas sobrepostos e espectros interativos.
- Comparar várias amostras com visualizações de mapa de calor.

# Entre em contato conosco

---

## Treinamento do consumidor

- Na América do Norte: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- Na Europa: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- Fora da União Europeia e da América do Norte, visite [sciex.com/education](http://sciex.com/education) para obter informações de contato.

## Centro de aprendizagem online

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX Support

A SCIEX e seus representantes mantêm uma equipe de atendimento totalmente treinada e especialistas técnicos localizados em todo o mundo. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que possam surgir. Para obter mais informações, visite o site da SCIEX em [sciex.com](http://sciex.com) ou entre em contato conosco através de uma das seguintes maneiras:

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

## Segurança cibernética

Para obter informações sobre as orientações mais recentes sobre cibersegurança para produtos da SCIEX, visite [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Documentação

Esta versão do documento substitui todas as versões anteriores deste documento.

Para visualizar este documento eletronicamente é necessário o Adobe Acrobat Reader. Para fazer download da versão mais recente, acesse <https://get.adobe.com/reader>.

Para encontrar a documentação do software, consulte as notas de versão do software ou o guia de instalação do software que o acompanha.

Para encontrar a documentação o produto de hardware, consulte o DVD de documentação para o sistema ou componente.

As versões mais recentes da documentação estão disponíveis no site da SCIEX, em [sciex.com/customer-documents](http://sciex.com/customer-documents).

Entre em contato conosco

---

**Nota:** Para solicitar uma versão impressa gratuita, entre em contato com [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us).

---