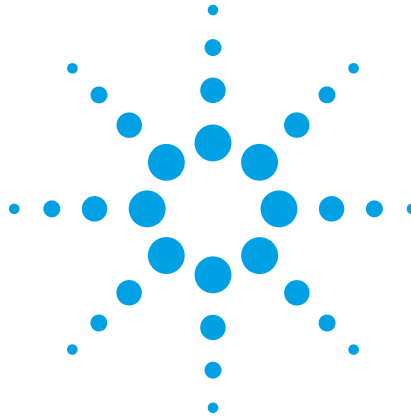




Logiciel pour le poste de travail Agilent MassHunter

Analyse qualitative

**Guide de familiarisation
pour CPG/SM**



Agilent Technologies

Notices

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Conformément aux lois internationales relatives à la propriété intellectuelle, toute reproduction, tout stockage électronique et toute traduction de ce manuel, totaux ou partiels, sous quelque forme et par quelque moyen que ce soit, sont interdits sauf consentement écrit préalable de la société Agilent Technologies, Inc.

Référence du manuel

G3335-93147

Edition

Révision A, novembre 2012

Imprimé aux États-Unis

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051, États-Unis
Microsoft[®], Windows 7[®] et Excel[®] sont des marques déposées de Microsoft Corporation aux États-Unis et dans d'autres pays.

Révision logicielle

Ce manuel s'applique à l'édition B.06.00 et aux révisions ultérieures du programme Logiciel pour le poste de travail Agilent MassHunter – Analyse qualitative, jusqu'à ce qu'il soit remplacé.

Garantie

Les informations contenues dans ce document sont fournies en l'état et pourront faire l'objet de modifications sans préavis dans les éditions ultérieures. De plus, dans la mesure autorisée par les lois applicables, Agilent décline toute garantie expresse ou implicite en ce qui concerne ce manuel et toute information qu'il contient y compris – mais sans que cela soit limitatif – tout type de garantie implicite de valeur marchande et d'adéquation à une application particulière. Agilent ne saurait en aucun cas être tenu pour responsable des erreurs ou des dommages incidents ou consécutifs, liés à la fourniture, à l'utilisation ou à l'exactitude de ce document ou aux performances de tout produit Agilent auquel il se rapporte. Si Agilent et l'utilisateur ont passé un contrat écrit distinct, stipulant, pour le produit couvert par ce document, des conditions de garantie qui entrent en conflit avec les présentes conditions, les conditions de garantie du contrat distinct remplacent les conditions énoncées dans le présent document.

Licences technologiques

Le matériel et le logiciel décrits dans ce document sont protégés par un accord de licence et leur utilisation ou reproduction sont soumises aux termes et conditions de ladite licence.

Limitation des droits

Limitations des droits du Gouvernement des États-Unis Les droits s'appliquant au logiciel et aux informations techniques concédées au gouvernement fédéral incluent seulement les droits concédés habituellement aux clients utilisateurs. Agilent concède la licence commerciale habituelle sur le logiciel et les informations techniques suivant les directives FAR 12.211 (informations techniques) et 12.212 (logiciel informatique) et, pour le ministère de la Défense, selon les

directives DFARS 252.227-7015 (informations techniques – articles commerciaux) et DFARS 227.7202-3 (droits s'appliquant aux logiciels informatiques commerciaux ou à la documentation des logiciels informatiques commerciaux).

Signalisation de la sécurité

ATTENTION

La mention **ATTENTION** indique un risque. Si la manœuvre ou la procédure correspondante n'est pas exécutée correctement, il peut y avoir un risque d'endommagement de l'appareil ou de perte de données importantes. En présence de la mention **ATTENTION**, il convient de s'interrompre tant que les conditions indiquées n'ont pas été parfaitement comprises et satisfaites.

AVERTISSEMENT

La mention **AVERTISSEMENT** signale un danger pour la sécurité de l'opérateur. Si la manœuvre ou la procédure correspondante n'est pas exécutée correctement, il peut y avoir un risque grave, voire mortel pour les personnes. En présence d'une mention **AVERTISSEMENT**, il convient de s'interrompre tant que les conditions indiquées n'ont pas été parfaitement comprises et satisfaites.

À propos de ce manuel...

Le présent manuel contient des informations destinées à vous apprendre à utiliser le Logiciel pour le poste de travail Agilent MassHunter – Analyse qualitative avec des données CPG/SM.

Avant de commencer les exercices, lisez les instructions de la section « [Avant de commencer ces exercices...](#) » à la page 5.

Exercice 1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Au cours de cet exercice, vous allez explorer certaines des nombreuses fonctionnalités performantes du programme d'analyse qualitative. Ces tâches sont importantes, quel que soit le type de données que vous utilisez.

Exercice 2 Détection et identification

Au cours de ces deux ensembles de tâches, vous recherchez et identifiez les basses concentrations en sulfamides au sein d'une matrice complexe et générez leurs formules pour les données TOF et Q-TOF. Vous effectuez également une d'extraction de motifs moléculaires de Protein Digest avec des données TOF et Q-TOF. Ces tâches peuvent également être effectuées avec des données Triple Quad.

Exercice 3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Au cours de ces tâches, vous allez apprendre comment configurer et exécuter toute méthode d'analyse qualitative. Vous apprendrez également à éditer une méthode d'automatisation de l'analyse et/ou une identification du composé. Vous exécuterez ensuite les actions dans la méthode automatisée lorsque vous ouvrirez un fichier de données. Vous apprendrez également à créer une méthode pour exécuter des actions automatisées avec une liste de tâches. Chacune de ces tâches est exécutée à l'aide d'un flux de travaux différent.

Référence

Dans ce chapitre, vous allez apprendre des principes de base du programme Qualitative Analysis.

Nouveautés

de B.06.00

- Vous pouvez réviser des composés dans la fenêtre Compound Details View. Quatre fenêtres supplémentaires sont disponibles dans Compound Details View.
- Pour Compound Details View, vous pouvez définir différentes définitions de ligne pour différents types de chromatogrammes et spectres.
- L'algorithme Find Compounds by Integration est disponible.
- Vous pouvez rechercher dans plusieurs bibliothèques pour l'algorithme Unit Mass Library Search.
- Dans l'algorithme Generate Formulas, vous pouvez choisir d'annoter les pics de spectre fragment avec des formules. L'annotation fragment sélectionne des spectres pour annoter en fonction de l'algorithme d'analyse des composés.
- L'algorithme Generate Formulas peut être exécuté sur des composés détectés par l'algorithme Find by Chromatogram Deconvolution.
- L'algorithme Generate Formula a été modifié pour vous permettre d'entrer un nombre maximum d'éléments trouvés pour chaque vecteur de charge.
- Dans l'algorithme Generate Formulas, vous pouvez grouper les éléments trouvés avec la même formule, mais avec différents vecteurs de charge.
- Des composés peuvent être créés à partir d'un spectre utilisateur. Dans ce cas, l'algorithme d'analyse des composés est Spectrum Extraction.
- Lorsque vous enregistrez des résultats avec un fichier de données, vous pouvez choisir d'enregistrer tous les résultats des composés avec un fichier de données ou un ensemble plus petit de résultats pour chaque composé. Les chromatogrammes utilisateur et les spectres utilisateur sont toujours enregistrés.
- Le format du fichier CEF a été modifié de façon à ce que davantage d'informations soient incluses.
- Les informations relatives au m/z et à l'espèce de l'ion sont disponibles dans le premier niveau du tableau Spectrum Identification Results.
- Le tableau Spectrum Identification a été modifié. Vous pouvez ajouter un filtre à une colonne et vous pouvez supprimer une ligne.
- Vous pouvez désormais libeller un pic avec Formula & Ion Species.

- Le changement du spectre libellé Best dans la fenêtre Spectrum Identification Results lorsque vous disposez d'un grand nombre d'entrées est désormais considérablement plus rapide.
- Vous pouvez spécifier le chevauchement des chromatogrammes de composés dans Compound Report.
- Le modèle de rapport par défaut Formula Confirmation a été modifié pour inclure la colonne colorée Flags (Tgt) et le tableau Fragment comporte la colonne colorée Flags (FIs).

Avant de commencer ces exercices...

- Installez le logiciel. Pour les instructions, reportez-vous au Guide d'installation.
- Copiez le dossier nommé **Data** du disque d'installation au format non compressé à l'emplacement de votre choix sur votre disque dur.

Ce dossier contient tous les fichiers de données requis pour ces exercices. Il se peut que vous deviez extraire au préalable les fichiers de données de leur format .zip.

REMARQUE

Ne réutilisez pas les fichiers de données exemples déjà présents sur votre système, à moins d'être sûr de les avoir copiés à partir des fichiers originaux du disque et que vous êtes la seule personne à les utiliser. Si les fichiers de données exemples déjà présents sur le système ne correspondent pas exactement aux originaux présents sur le disque, les résultats obtenus pendant les exercices ne correspondront pas aux illustrations de ce manuel.

Table des matières

Exercice 1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative 9

- Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative 10
- Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM 13
- Tâche 3. Zoom avant et arrière sur le chromatogramme 16
- Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme 17
- Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres 19
- Tâche 6. Extraction de chromatogrammes 21
- Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme CPG/SM 23
- Tâche 8. Calculez les valeurs d'adéquation du système (System Suitability) 28
- Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme 32
- Tâche 10. Ajout d'annotations 42
- Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse 46

Exercice 2 Détection et identification 49

- Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme 50
- Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque 54
- Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement) 59
- Tâche 15. Détection de composés par intégration 63
- Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic 66
- Tâche 17. Enregistrement des résultats 72

Exercice 3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression 77

- Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général 78
- Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening 83
- Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF 87

Table des matières

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse 89

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé 92

Référence 95

Utilisation des fenêtres 96

Utilisation des données de résultats dans Data Navigator 99

Exécution d'opérations sur le chromatogramme 100

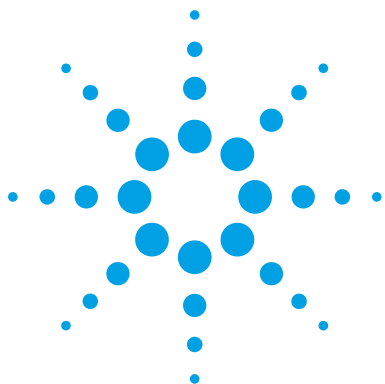
Exécution d'opérations sur un spectre SM ou SM/SM 101

Utilisation de données chromatographiques visuelles 102

Utilisation de données spectrales visuelles 104

Flux de travaux 105

Personnalisation d'un modèle de rapport 109



1

Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative	10
Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM	13
Tâche 3. Zoom avant et arrière sur le chromatogramme	16
Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme	17
Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres	19
Tâche 6. Extraction de chromatogrammes	21
Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme CPG/SM	23
Tâche 8. Calculez les valeurs d'adéquation du système (System Suitability)	28
Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme	32
Tâche 10. Ajout d'annotations	42
Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse	46

Au cours de cet exercice, vous allez explorer certaines des nombreuses fonctionnalités performantes du programme d'analyse qualitative pour travailler avec des données de CPG/Q-TOF et CPG/QQQ.

Chaque exercice est présenté dans un tableau à trois colonnes:

- Étapes: utilisez ces instructions générales afin d'explorer le programme par vous-même.
- Instructions détaillées: utilisez-les si vous avez besoin d'aide ou si vous préférez suivre une méthode d'apprentissage pas à pas.
- Remarques: lisez-les pour obtenir des astuces et des informations supplémentaires sur chaque étape de l'exercice.



Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative

Au cours de cette tâche, vous allez ouvrir plusieurs fichiers de données à l'aide de la méthode habituelle.

Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative avec plusieurs fichiers de données

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le programme d'analyse qualitative. Ouvrez les fichiers de données Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d et MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier \\MassHunter\Data, ou dans le dossier dans lequel vous les avez copiés.	a Double-cliquez sur l'icône Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00 . Le système ouvre la boîte de dialogue Open Data Files. b Accédez au dossier \\MassHunter\Data\GC ou au dossier dans lequel se trouvent les fichiers d'exemples.	- Le fichier Pest - 200 - Scan.d contient des données SM, tandis que les fichiers Pest - STD 200 MRM.d et Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d contiennent des données SM et SM/SM (CPG/QQQ). Le fichier MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d contient des données CPG/Q-TOF. - Vous pouvez obtenir de l'aide sur la plupart des fenêtres, boîtes de dialogue et onglets en appuyant sur la touche F1 lorsque la fenêtre est active.

- Assurez-vous que le bouton **Use current method** est sélectionné.
- Vérifiez que la case **Load result data** n'est pas cochée. Si cette case n'est pas disponible, cela signifie qu'aucun résultat n'a été enregistré dans le fichier de données. Pour savoir comment enregistrer des résultats, reportez-vous aux instructions de la « **Tâche 17. Enregistrement des résultats** », page 72.
- Vérifiez que la case **Run 'File Open' actions from selected method** n'est pas cochée.

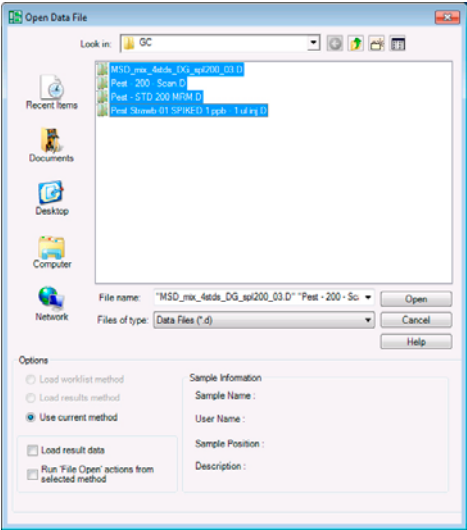


Figure 1 Ouvrir des fichiers de données lors de l'ouverture du logiciel

Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative avec plusieurs fichiers de données (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
	c Appuyez sur la touche Maj et maintenez-la enfoncée pendant que vous cliquez sur Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d et MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d. d Cliquez sur Open. Les quatre fichiers de données apparaissent dans la fenêtre Data Navigator, et 1 à 3 chromatogrammes sont affichés dans la fenêtre Chromatogram Results. e Cliquez sur l'icône List Mode  dans la barre d'outils Chromatogram Results.	• Si vous appuyez sur la touche Ctrl, vous pouvez sélectionner des fichiers qui ne figurent pas directement l'un derrière l'autre dans la liste. • Ce que vous pouvez voir dans la fenêtre principale à ce stade dépend de la méthode, de l'agencement, de l'affichage et des paramètres de tracé utilisés avant que vous n'ouvriez ces fichiers. • Lorsque vous cliquez sur l'icône List Mode, la couleur de son fond change et devient orange.

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative
Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative

Tâche 1. Ouverture du programme d'analyse qualitative avec plusieurs fichiers de données (suite)

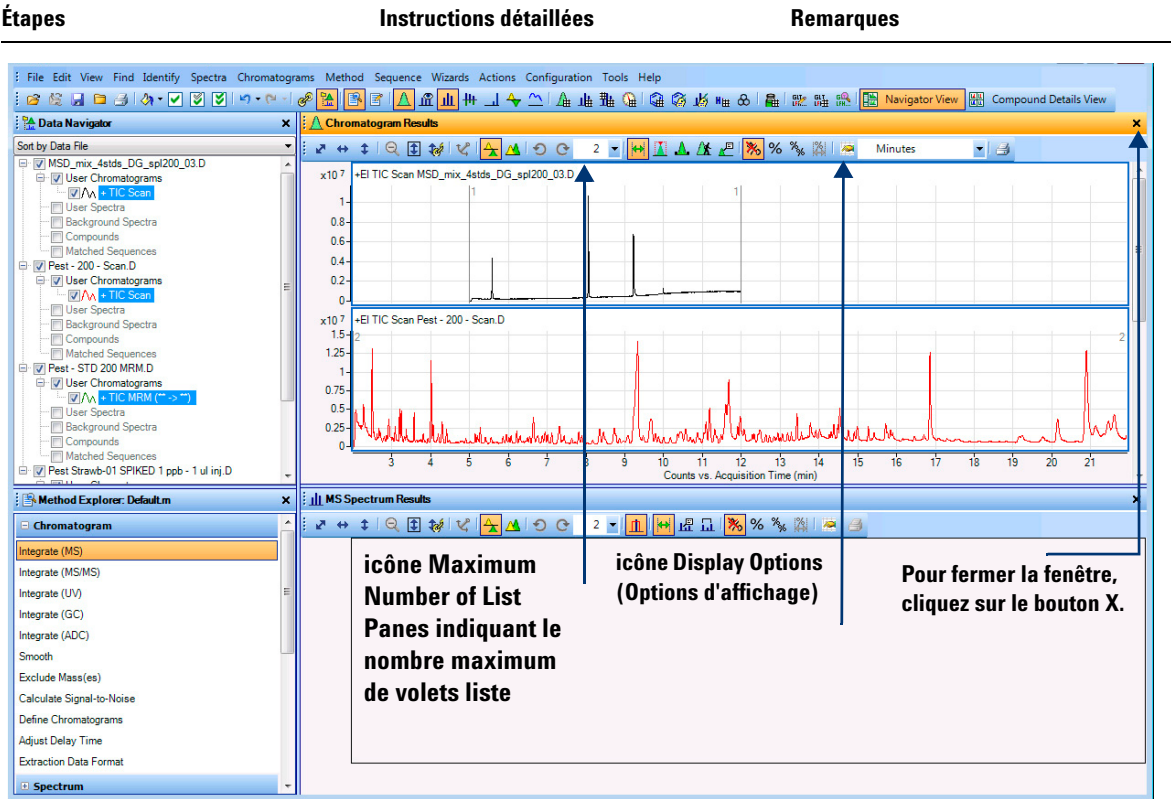


Figure 2 Fenêtre principale de l'analyse qualitative avec l'écran GC/Q-TOF Compound Screening Workflow chargé.

Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM

Dans cette tâche, vous passez au flux de travaux général (pour les clients CPG/QQQ) ou au flux de travaux de criblage des composés CPG/Q-TOF (pour les clients CPG/Q-TOF). Ces deux flux de travaux sont les seuls qui prennent en charge l'analyse des données CPG/SM. Ensuite, ouvrez la boîte de dialogue User Interface Configuration et cochez les cases appropriées pour un système CPG/QQQ ou CPG/Q-TOF.

Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Si nécessaire, ouvrir le programme d'analyse qualitative.	a Double-cliquez sur l'icône Agilent MassHunter Qualitative Analysis . Le système ouvre la boîte de dialogue Open Data Files. b Cliquez sur Cancel dans la boîte de dialogue Open Data Files.	Vous pouvez obtenir de l'aide sur n'importe quelle fenêtre, boîte de dialogue ou onglet en appuyant sur la touche F1 lorsque la fenêtre est active.
2 Passer au flux de travaux général ou au flux de travaux de criblage des composés CPG/Q-TOF.	a Si vous disposez d'un instrument CPG/QQQ, cliquez sur l'option Configuration > Configure for Workflow > General. Si vous disposez d'un instrument CPG/Q-TOF, cliquez sur l'option Configuration > Configure for Workflow > GC/Q-TOF Compound Screening. b Cliquez sur le bouton Load workflow's default method et le bouton Load workflow's default layout. c Cliquez sur OK. d Cliquez sur l'icône List Mode  dans la barre d'outils Chromatogram Results.	- Si le programme d'acquisition des données pour CPG/QQQ ou CPG/Q-TOF est installé sur le même ordinateur, le logiciel configure automatiquement l'interface utilisateur. La section GC/Q-TOF Compound Screening peut être déjà disponible dans la fenêtre Method Explorer. - Par défaut, les chromatogrammes sont superposés. Pour ces exemples, les chromatogrammes sont affichés en Mode liste.

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM

Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
3	Si vous disposez d'un CPG/QQQ, configurez l'interface utilisateur afin que seules les fonctions CPG/QQQ s'affichent. a Cliquez sur Configuration > User Interface Configuration. b Sous Separation types, cochez uniquement la case GC. c Si vous disposez d'un instrument CPG/QQQ, sous Ionization type, cochez la case EI or other "hard" ionization technique et désélectionnez la case CI, APCI, ESI, MADLDI or other "soft" ionization technique. d Sous Mass accuracy, désélectionnez la case Accurate mass (TOF, Q-TOF). Cochez la case Unit mass (Q, QQQ). e Sous Optional software features, désélectionnez les cases Peptide Sequence Editor et BioConfirm Software. f Sous Non-MS detectors, désélectionnez les cases UV et ADC. g Cochez la case Show advanced parameters. h Cliquez sur OK.	- La boîte de dialogue User Interface Configuration permet de changer les options disponibles. - Si une fonction n'est pas visible, elle était probablement masquée lorsqu'une case a été désélectionnée dans la boîte de dialogue User Interface Configuration.

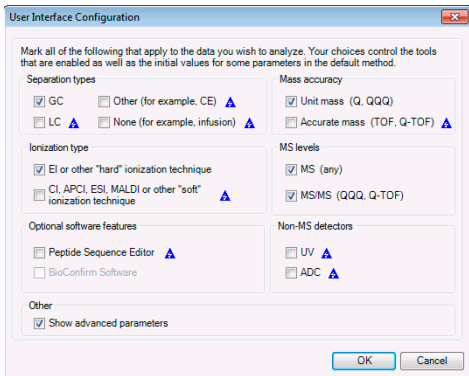


Figure 3 Configuration de l'interface utilisateur à utiliser avec des données CPG/QQQ

Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4	Si vous disposez d'un CPG/Q-TOF, configurez l'interface utilisateur afin que seules les fonctions CPG/Q-TOF s'affichent. a Cliquez sur Configuration > User Interface Configuration. b Sous Separation types, cochez uniquement la case GC. c Sous Ionization type, cochez les deux cases. d Sous MS levels, cochez les deux cases. e Sous Mass accuracy, cochez la case Accurate mass (TOF, Q-TOF). Désélectionnez la case Unit mass (Q, QQQ). f Sous Optional software features, désélectionnez les cases Peptide Sequence Editor et BioConfirm Software. g Sous Non-MS detectors, désélectionnez les cases UV et ADC. h Cochez la case Show advanced parameters. i Cliquez sur OK.	- La boîte de dialogue User Interface Configuration permet de changer les options disponibles. - Si une fonction n'est pas visible, elle était probablement masquée lorsqu'une case a été désélectionnée dans la boîte de dialogue User Interface Configuration.

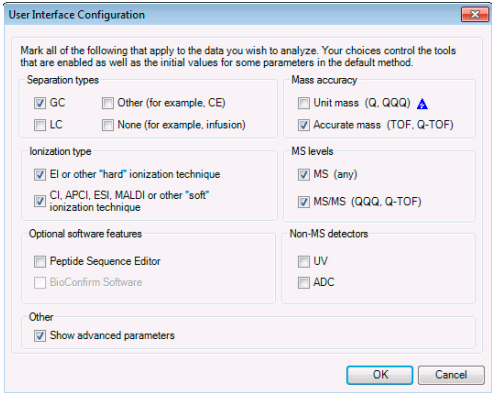


Figure 4 Configuration de l'interface utilisateur pour un CPG/Q-TOF

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 3. Zoom avant et arrière sur le chromatogramme

Tâche 3. Zoom avant et arrière sur le chromatogramme

Cette tâche vous permet de vous familiariser avec les fonctions de zoom avant et arrière du programme d'analyse qualitative.

Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme

Au cours de cette tâche, vous allez ancrer un chromatogramme. Si vous ancrez un chromatogramme, le chromatogramme ancré reste affiché en permanence pendant que vous faites défiler les autres chromatogrammes pour les afficher.

Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
• Ancrer un chromatogramme. • Afficher tous les chromatogrammes. • S'assurer que la liste d'affichage des chromatogrammes est définie à 1. • Dans la fenêtre Chromatogram Results, sélectionnez le deuxième chromatogramme de courant ionique total (CIT). • Ancrer ce CIT. • Faire défiler les chromatogrammes. • Supprimer l'ancrage.	a Dans la fenêtre Data Navigator, cochez les cases correspondant aux chromatogrammes que vous avez masqués au cours de la précédente tâche. b Assurez-vous que le nombre maximal de volets est défini à 1 dans la fenêtre Chromatogram Results. c Dans la fenêtre Chromatogram Results, sélectionnez le deuxième chromatogramme de courant ionique total (CIT). d Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le chromatogramme, puis cliquez sur Set Anchor. e Utilisez la barre de défilement dans la fenêtre Chromatogram Results pour faire défiler la liste de chromatogrammes. Le deuxième CIT reste toujours visible comme le premier chromatogramme. f Cliquez sur Chromatograms > Clear Anchor.	• Lorsque vous définissez un ancrage pour un chromatogramme, une icône représentant une ancre apparaît dans la fenêtre Data Navigator, en regard du nom du chromatogramme ancré. • Deux chromatogrammes apparaissent dans la fenêtre Chromatogram Results après que l'un d'eux ait été ancré bien que la liste d'affichage soit définie à 1. Ceci signifie que vous affichez un chromatogramme en plus du chromatogramme ancré. • Vous pouvez également cliquer avec le bouton droit de la souris sur le chromatogramme, puis cliquer sur Clear Anchor dans le menu contextuel.

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme

Tâche 4. Ancrage d'un chromatogramme (suite)

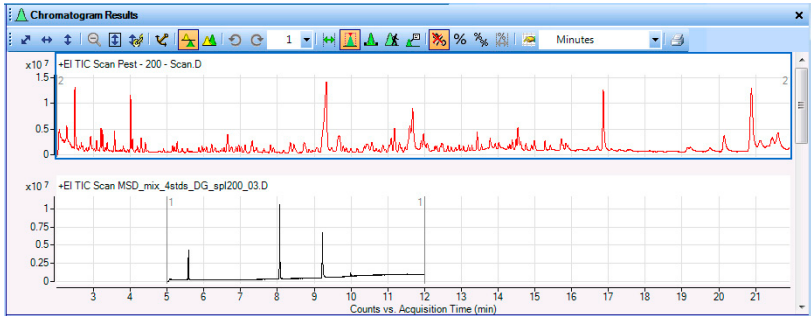
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		

Figure 5 CIT ancré dans la fenêtre Chromatogram Results

Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres

Au cours de cette tâche, vous allez déplacer des fenêtres dans la vue principale et créer diverses présentations des fenêtres.

Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Changer la disposition des fenêtres: - Changer la taille des fenêtres. - Enregistrer une disposition de fenêtres. - Déverrouiller la disposition. - Changer la fenêtre Chromatogram Results afin qu'elle devienne flottante. - Déplacer la fenêtre Chromatogram Results. - Afficher les outils pour repositionner les fenêtres.	- Pour changer la taille d'une fenêtre, faites glisser la limite entre les fenêtres. - Pour enregistrer une disposition de fenêtres, cliquez sur Configuration > Window Layouts > Save Layout. - Pour déverrouiller une disposition, cliquez sur Configuration > Window Layouts > Lock Layout. - Pour rendre une fenêtre flottante, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la barre de titre de la fenêtre et cliquez sur l'option Floating dans le menu contextuel. - Pour déplacer une fenêtre, cliquez sur la barre de titre de la fenêtre et faites-la glisser à l'emplacement souhaité. - Pour afficher les outils de repositionnement, faites glisser la fenêtre sur l'une des autres fenêtres. Lorsque qu'une fenêtre est chevauchée par une autre, le programme affiche plusieurs outils de mise en page, comme illustré à la Figure 6.	- Si la disposition est déverrouillée, le système n'affiche pas de marque en regard du menu Lock Layout. - Vous ne pouvez utiliser les outils de repositionnement que si la disposition est déverrouillée. - Vous pouvez également rendre une fenêtre flottante en double-cliquant sur la barre de titre de la fenêtre. - Plusieurs présentations différentes sont déjà créées dans le logiciel. Vous pouvez également essayer de les charger. - Le logiciel comporte plusieurs flux de travaux différents. Chaque flux de travaux charge une présentation différente. Le fait de passer à un autre flux de travaux change également la présentation.

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative
Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres

Tâche 5. Changement de disposition des fenêtres (suite)

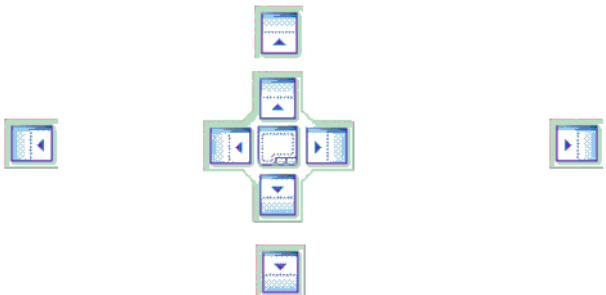
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		

Figure 6 Outils de repositionnement des fenêtres

2 Repositionner la fenêtre Chromatogram Results.	• Si vous passez le curseur sur l'une des petites icônes, la fenêtre que vous faites glisser sera placée au-dessus, à droite, en dessous ou à gauche de toutes les autres fenêtres. • Faites glisser le curseur sur la grande icône. La fenêtre peut être également placée au-dessus, à droite, en dessous ou à gauche de l'autre fenêtre en faisant glisser le curseur sur les côtés de la grande icône. • Pour épingler deux fenêtres ensemble, faites glisser le curseur au centre de la grande icône. Vous verrez une version ombrée des deux fenêtres épinglées ensemble. Cessez de faire glisser la souris. Les deux fenêtres sont épinglées ensemble. • Cliquez sur Configuration > Window Layouts > Restore Default Layout.	• Le curseur doit se trouver sur l'une des flèches dans une boîte pour que le repositionnement ait lieu. • Le fait de cliquer sur Restore Default Layout restaure la présentation utilisée dans le flux de travaux général et celui de criblage des composés CPG/Q-TOF. Si vous utilisez un autre flux de travaux, vous devez charger la disposition utilisée avec celui-ci.
--	--	---

Tâche 6. Extraction de chromatogrammes

Au cours de cette tâche, vous allez extraire et fusionner des chromatogrammes du CIT d'origine.

Tâche 6. Extraction de chromatogrammes

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Extraire et faire fusionner des chromatogrammes d'ions extraits (CIE) de deux masses dans le fichier de données Pest - 200 Scan.d . - Les valeurs m/z sont 129.0 et 414.2. - Ne pas fusionner les pics de masses individuelles dans un chromatogramme.	a Dans la fenêtre Data Navigator, désélectionnez les cases à cocher des fichiers de données, excepté le fichier Pest - 200 Scan.d. b Ouvrez la boîte de dialogue Extract Chromatograms, à l'aide de l'option ci-dessous ou de l'une des options de droite: Cliquez sur Chromatograms > Extract Chromatograms. c Dans la boîte List of opened data files, cliquez sur Pest - 200 - Scan.d. d Dans la zone de liste Type, sélectionnez EIC. e Dans le champ m/z value(s), saisissez 129.0, 414.2. f Le cas échéant, désélectionnez la case Merge multiple masses into one chromatogram pour fusionner les CIE. g Cliquez sur OK. h Définissez le nombre maximum de volets liste à 3 dans la barre d'outils Chromatogram Results.	- Vous pouvez également extraire des chromatogrammes de l'une des manières suivantes: - Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le chromatogramme, puis cliquez sur Extract Chromatograms. - Dans Data Navigator, sélectionnez TIC Scan pour sulfas_PosMS.d, puis cliquez avec le bouton droit de la souris sur TIC Scan et cliquez sur Extract Chromatograms. - Vous pouvez utiliser la valeur All ou MS pour MS level. - Notez que vous pouvez également choisir que le chromatogramme extrait soit automatiquement intégré après l'extraction. - Vous pouvez également extraire un chromatogramme d'un spectre de masse.

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 6. Extraction de chromatogrammes

Tâche 6. Extraction de chromatogrammes (suite)

Étapes

Instructions détaillées

Remarques

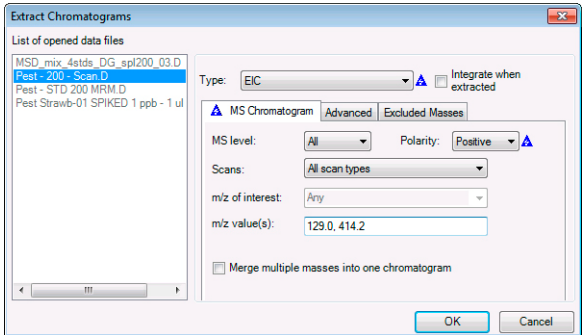


Figure 7 Boîte de dialogue Extract Chromatograms

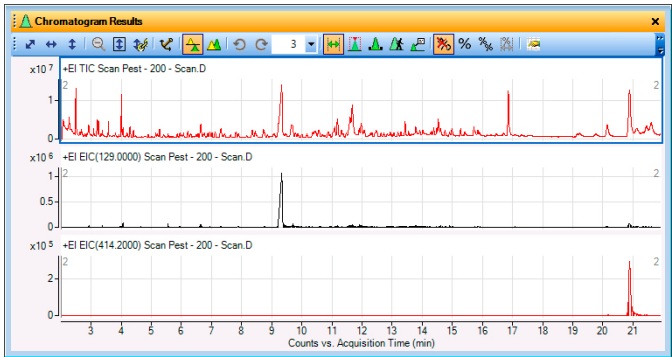


Figure 8 Chromatogrammes d'ions extraits (CIE) fusionnés comparés au CIT d'origine

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme CPG/SM

Au cours de cette tâche, vous allez apprendre différentes façons d'intégrer un chromatogramme, de changer les paramètres d'intégration pour modifier les résultats et calculer le rapport signal/bruit pour les pics intégrés de données SM/SM.

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme (CPG/SM)

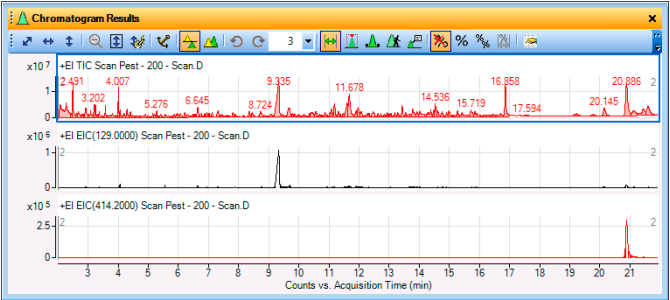
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Intégrer le chromatogramme TIC Scan pour le fichier de données Pest - 200 - Scan.d , à l'aide de n'importe laquelle des options indiquées à droite.	a Sélectionnez le fichier de données Pest - 200 - Scan.D dans la fenêtre Data Navigator. b Sélectionnez le chromatogramme TIC Scan et utilisez l'une des options suivantes: - Dans la barre de menus, cliquez sur Chromatograms > Integrate Chromatogram. - Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans la fenêtre du chromatogramme, puis cliquez sur Integrate Chromatogram. - Dans la fenêtre Data Navigator, sélectionnez Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms > TIC Scan, puis cliquez avec le bouton droit de la souris sur TIC Scan et cliquez sur Integrate Chromatogram.	- Notez que le programme a pratiquement intégré tous les pics dans le chromatogramme. - Utilisez la fenêtre Method Editor pour sélectionner l'intégrateur à utiliser pour les données SM, les données SM/SM et les données CPG. - Ce chromatogramme est un chromatogramme SM, les valeurs définies dans la section Integrate (MS) de la fenêtre Method Editor sont donc utilisées lors de l'intégration de ce chromatogramme.
2 Afficher uniquement deux chromatogrammes à la fois.	Sélectionnez 2 comme nombre maximum de volets liste dans la barre d'outils Chromatogram Results.	

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme CPG/SM

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme (CPG/SM) (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
--------	-------------------------	-----------



De nombreux petits pics sont

Figure 9 Chromatogramme TIC Scan intégré avec de nombreux petits pics

- | | | |
|---|--|--|
| <p>3 Changer le seuil pour intégrer moins de pics.</p> <ul style="list-style-type: none">Changer le seuil pour ne garder que les trois plus grands pics. | <p>a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Chromatogram > Integrate (MS) pour afficher l'onglet Integrate (MS).</p> <p>b Sélectionnez l'intégrateur Agile.</p> <p>c Cliquez sur l'onglet Peak Filters.</p> <p>d Sous Maximum number of peaks, cochez Limit (by height) to the largest, et tapez 3.</p> | <ul style="list-style-type: none">Notez le triangle bleu qui s'affiche lorsque vous changez la valeur d'un paramètre sauvegardée dans la méthode en cours. Lorsque vous enregistrez la méthode, les triangles disparaissent. |
|---|--|--|

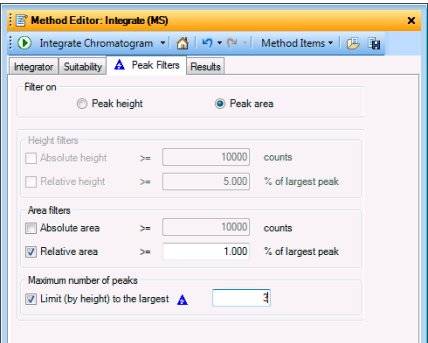


Figure 10 Onglet Peak Filters avec la case **Limit (by height) to the largest** cochée

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme (CPG/SM) (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4 Réintégrer le chromatogramme.	e Cliquez sur le bouton  dans la barre d'outils Method Editor pour effectuer l'intégration avec le nouveau paramètre.	• Notez que seuls les trois plus grands pics sont désormais intégrés. • Le pic 2,491 est plus haut que celui enregistré à 16,858minutes, il est donc sélectionné comme troisième pic.

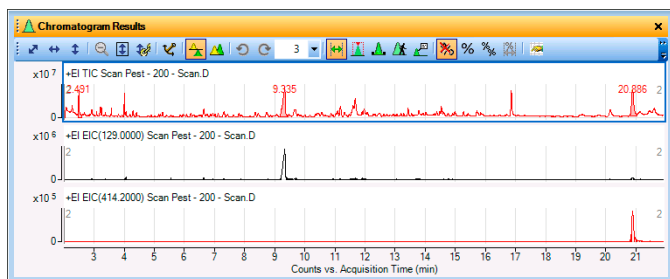


Figure 11 Chromatogramme TIC Scan intégré lors de la réduction du nombre de pics

5 Intégrer le chromatogramme TIC MRM pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.D .	a Dans la fenêtre Data Navigator, sélectionnez TIC MRM pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d. b Utilisez l'une des options suivantes pour intégrer les chromatogrammes. • Dans la barre de menus, cliquez sur Chromatograms > Integrate Chromatogram. • Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans la fenêtre du chromatogramme, puis cliquez sur Integrate Chromatogram. • Dans la fenêtre Data Navigator, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le chromatogramme en surbrillance et cliquez sur Integrate Chromatogram. c Effectuez un zoom avant de 5,8 à 8,5 minutes. d Définissez le nombre maximum de volets liste à 2.	• Appuyez sur la touche Ctrl pour sélectionner plusieurs chromatogrammes dans la fenêtre Data Navigator. • Notez que le programme a pratiquement intégré tous les pics dans le chromatogramme. • Ces chromatogrammes sont des chromatogrammes SM/SM, les valeurs définies dans la section Integrate (MS/MS) de la fenêtre Method Editor sont donc utilisées lors de l'intégration de ce chromatogramme. Vous pouvez sélectionner l'intégrateur à utiliser pour intégrer des chromatogrammes SM et un autre intégrateur pour les chromatogrammes SM/SM.
---	---	---

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme CPG/SM

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme (CPG/SM) (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
--------	-------------------------	-----------

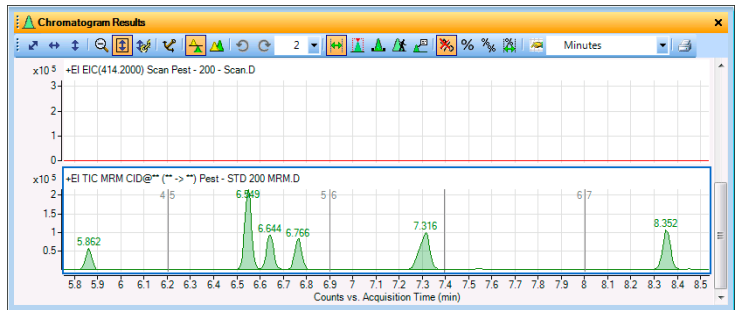


Figure 12 Chromatogrammes MRM intégrés

- 6** Sélectionnez l'intégrateur **MS/MS (GC)**. Changer le filtre pour n'accepter que les pics ayant une hauteur absolue égale ou supérieure à 20000.
- a** Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez **Chromatogram > Integrate (MS/MS)**.
 - b** Sélectionnez **MS/MS (GC)** comme **intégrateur**.
 - c** Cliquez sur l'onglet **Peak Filters**.
 - d** Sous **Filter on**, cliquez sur **Peak height**.
 - e** Sous Height filters, cochez la case **Absolute height**.
 - f** Tapez 60000 comme valeur de **Absolute height**.
- Notez le triangle bleu qui s'affiche lorsque vous changez la valeur d'un paramètre sauvegardée dans la méthode en cours. Lorsque vous enregistrez la méthode, les triangles disparaissent.

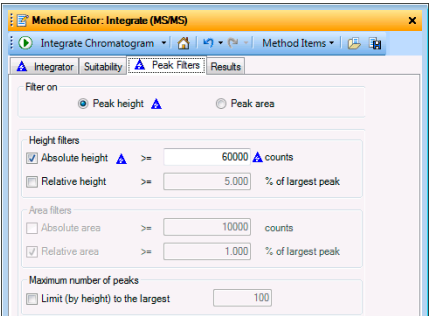
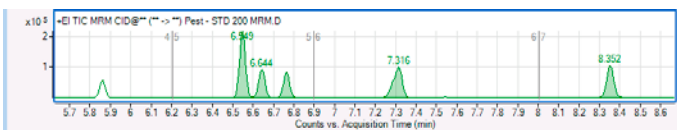


Figure 13 Onglet Peak Filters avec case **Absolute height** cochée

Tâche 7. Intégration interactive d'un chromatogramme (CPG/SM) (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
7 Réintégrer le chromatogramme.	g Cliquez sur le bouton  dans la barre d'outils Method Editor.	• Notez que seuls les plus grands pics sont désormais intégrés.
 Le petit pic situé à 5,8min n'est plus inclus dans les résultats d'intégration, car la hauteur absolue de ce pic est inférieure à 60000points.		
Figure 14 Chromatogrammes CIT et CIE SM/SM intégrés avec un paramètre de seuil plus élevé		
8 Restaurer les paramètres sauvegardés pour la méthode en cours et fermer la fenêtre Method Editor.	a Sélectionnez la section Chromatogram > Integrate (MS/MS) dans Method Explorer. b Cliquez sur l'icône  dans Method Editor. c Sélectionnez la section Chromatogram > Integrate (MS) dans Method Explorer. d Cliquez sur l'icône  dans Method Editor. e Fermez la fenêtre Method Editor.	• Pour annuler vos modifications et restaurer les valeurs de la méthode chargée, cliquez sur l'icône Restaurer les dernières valeurs enregistrées du fichier  dans la barre d'outils Method Editor.
9 Supprimer tous les chromatogrammes, excepté celui d'origine. Supprimer les résultats d'intégration du chromatogramme d'origine.	a Sous User Chromatograms dans la fenêtre Data Navigator, sélectionnez tous les chromatogrammes, excepté celui d'origine. b Cliquez avec le bouton droit de la souris sur les chromatogrammes sélectionnés et cliquez sur Delete. c Sélectionnez tous les chromatogrammes CIT. d Cliquez sur Chromatograms > Clear Results.	• Si vous utilisez l'option Clear Results, les chromatogrammes ne sont pas supprimés; mais les résultats liés aux chromatogrammes le sont. Dans ce cas, les valeurs d'intégration sont effacées.

Tâche 8. Calculez les valeurs d'adéquation du système (System Suitability)

Au cours de cette tâche, vous allez apprendre différentes façons d'intégrer de manière interactive un chromatogramme, de changer les paramètres d'intégration pour modifier les résultats et d'afficher le rapport signal/bruit pour chaque pic. Vous apprendrez également comment activer les calculs d'adéquation du système.

Tâche 8. Intégration interactive d'un chromatogramme (SM)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Intégrer les chromatogrammes MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d et Pest - 200 - Scan.d à l'aide de l'une des options indiquées à droite.	a Cochez la case en regard du fichier de données MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d dans la fenêtre Data Navigator. b Cochez la case en regard du fichier de données Pest - 200 - Scan.d dans la fenêtre Data Navigator. c Sélectionnez les deux CIT. d Intégrez le TIC Scan pour ces deux fichiers, à l'aide de l'une des options suivantes. • Dans le menu principal, cliquez sur Chromatograms > Integrate Chromatogram. • Sélectionnez le chromatogramme. Ensuite, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le chromatogramme, puis cliquez sur Integrate Chromatogram. • Dans Data Navigator, sélectionnez TIC Scan pour les deux fichiers de données. Ensuite, cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'un des chromatogrammes, puis cliquez sur Integrate Chromatogram.	• Pour le flux de travaux général, l'intégration utilise l'intégrateur General, car il s'agit de l'intégrateur sélectionné dans la méthode default.m. Pour le flux de travaux de criblage des composés CPC/Q-TOF, l'intégration utilise l'intégrateur Agile. • Vous pouvez changer cette valeur dans l'onglet Chromatogram > Integrate (MS) > Integrator. • Notez que l'intégration avec les paramètres par défaut détecte des pics très petits.

Tâche 8. Intégration interactive d'un chromatogramme (SM) (suite)

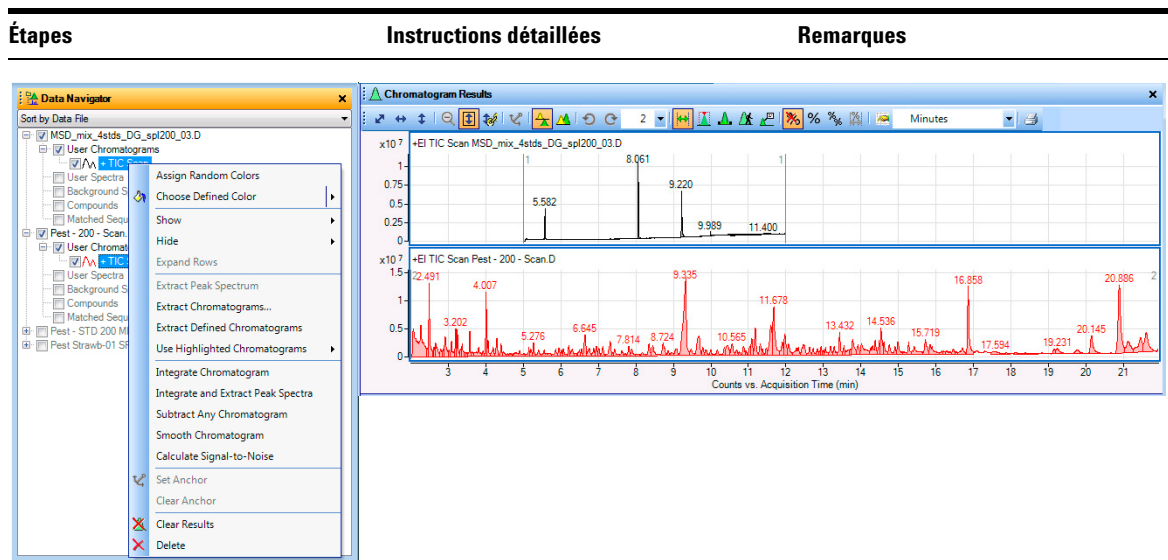


Figure 15 L'un des menus contextuels dans Data Navigator et les chromatogrammes intégrés

- | | | |
|--|--|--|
| <p>2 Activer les calculs d'adéquation du système pour les chromatogrammes SM.</p> | <p>a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Chromatogram > Integrate (MS) pour afficher l'onglet Integrator.</p> <p>b Cliquez sur l'onglet Suitability.</p> <p>c Cochez la case Enable system suitability calculations.</p> <p>d Sélectionnez United States Pharmacopoeia (USP).</p> <p>e Dans la boîte Column void time, tapez 1.</p> <p>f Dans la boîte Column length, tapez 3000.</p> | <ul style="list-style-type: none"> • Notez le triangle bleu qui s'affiche lorsque vous changez la valeur d'un paramètre sauvegardée dans la méthode en cours. Lorsque vous enregistrez la méthode, les triangles disparaissent. • Les algorithmes utilisés pour définir plusieurs des colonnes de la liste Integration Peak List changent en fonction de la pharmacopée sélectionnée. Pour plus d'informations, consultez l'aide en ligne. |
|--|--|--|

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 8. Calculez les valeurs d'adéquation du système (System Suitability)

Tâche 8. Intégration interactive d'un chromatogramme (SM) (suite)

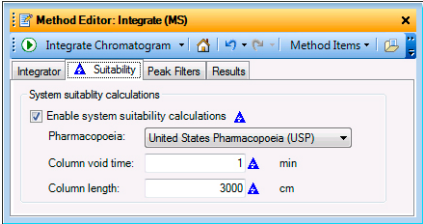
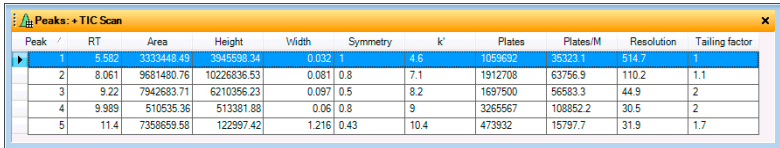
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		Les valeurs réelles de Column void time et Column length pour ces fichiers de données sont différentes de ces valeurs. Celles-ci ne sont utilisées qu'à titre d'exemple.

Figure 16 Onglet Suitability de Chromatogram > Integrate (MS)

3 Réintégrer le chromatogramme.	• Cliquez sur l'icône Intégrer le chromatogramme  dans la barre d'outils Method Editor pour effectuer l'intégration avec le nouveau paramètre.	
4 Afficher les calculs d'adéquation du système. • Ouvrir la fenêtre Integration Peak List. • Réviser les valeurs de la zone de bruit et calculer le rapport signal/bruit pour les pics intégrés.	- a Cliquez sur View > Integration Peak List. - b Cliquez avec le bouton de la souris dans l'en-tête de la fenêtre Peaks et cliquez sur Floating. - c Cliquez avec le bouton droit de la souris dans l'en-tête d'une colonne que vous ne souhaitez pas voir et cliquez sur Remove Column. - d Cliquez avec le bouton droit de la souris dans l'en-tête d'une colonne et cliquez sur Add/Remove Columns pour changer les colonnes visibles.	• Les calculs d'adéquation du système sont inclus dans le tableau Integration Peak List. • Les valeurs incluses sont notamment les suivantes: k', Tailing factor, Plates, Plates/M et Symmetry. • Vous pouvez également activer les calculs d'adéquation du système pour un chromatogramme SM, SM/SM ou SPG.



Peak	RT	Area	Height	Width	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.582	3333448.49	3945598.34	0.032	1	4.6	1059692	35323.1	514.7	1
2	8.061	9681480.76	10226836.53	0.081	0.8	7.1	1912708	63756.9	110.2	1.1
3	9.22	7942683.71	6210356.23	0.097	0.5	8.2	1697500	56583.3	44.9	2
4	9.989	510635.36	513381.88	0.06	0.8	9	3265667	108852.2	30.5	2
5	11.4	7358659.58	122997.42	1.216	0.43	10.4	473932	15797.7	31.9	1.7

Figure 17 Tableau des pics intégrés avec valeurs d'adéquation du système

Tâche 8. Intégration interactive d'un chromatogramme (SM) (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
5 Restaurer les paramètres de la méthode par défaut, fermer les fenêtres Method Editor et Integration Peak List.	a Pour annuler vos modifications et restaurer les valeurs de la méthode par défaut, cliquez sur l'icône Restaurer les dernières valeurs enregistrées du fichier  dans la barre d'outils Method Editor. b Fermez la fenêtre Method Editor. c Cliquez avec le bouton de la souris dans la fenêtre Integration Peak List et cliquez sur Floating. d Cliquez sur View > Integration Peak List.	Lorsque vous cliquez sur l'option Floating dans le menu contextuel pour la seconde fois, la fenêtre Integration Peak List est ancrée à son emplacement d'origine.

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Au cours de cette tâche, vous allez extraire un spectre exactement à l'endroit que vous spécifiez dans le chromatogramme. Le programme d'analyse qualitative extrait un spectre à parti d'un point de données spécifique ou extrait un spectre moyen d'une moyenne de plusieurs points ou plages de données.

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Parcourir un chromatogramme pour afficher l'ion précurseur et l'ion produit pour les quelques derniers pics de Pest - STD 200 MRM.d . - Effectuer un zoom avant sur la zone comprise entre 13 et 16 minutes. - Utiliser l'icône Walk Chromatogram. - Réviser le spectre en commençant environ à 13minutes et déplacer la flèche vers la droite.	a Sélectionnez la ligne Pest - 200 - MRM.D dans la fenêtre Data Navigator. b Fermez la fenêtre Method Editor. c Fermer la fenêtre MS Spectrum Results. d Cliquez sur le chromatogramme TIC MRM dans la fenêtre Data Navigator. e Cliquez sur l'icône Autoscale Y-axis during Zoom  dans la barre d'outils Chromatogram Results. f Sélectionnez 1 pour le nombre maximum de volets liste. g Pour effectuer un zoom avant sur quelques pics, cliquez avec le bouton droit de la souris au-dessus du pic à 13minutes et faites glisser le pointeur jusqu'à 16minutes, puis relâchez le bouton de la souris. h Cliquez sur l'icône Walk Chromatogram  dans la barre d'outils Chromatogram Results. i Déplacez le curseur Walk Chromatogram jusqu'au dessus de l'axeX à environ 13minutes et cliquez. j Pour naviguer d'un spectre à l'autre, utilisez les touches fléchées droite et gauche de votre clavier.	- L'outil Walk Chromatogram est particulièrement utile sur les données SM/SM pour identifier les ions précurseur et produit. - Le spectre de chaque point sur lequel vous cliquez dans la fenêtre Chromatogram Results s'affiche instantanément dans la fenêtre Spectrum Preview qui s'ouvre automatiquement. - Parfois, deux spectres sont affichés dans la fenêtre Spectrum Preview. Par exemple, deux spectres sont affichés dans la fenêtre Spectrum Preview pour chacun des points sur lesquels vous cliquez près du pic situé à 13,431min.

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

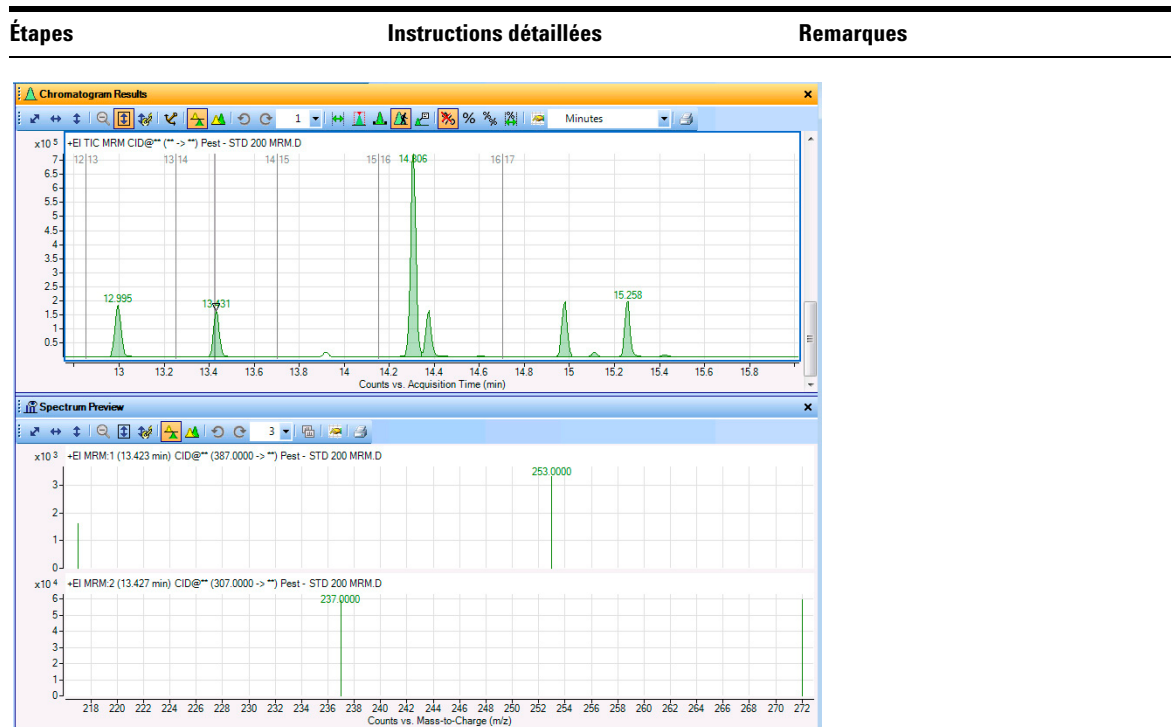


Figure 18 Parcours du chromatogramme pour visualiser les deux spectres MRM pour le pic situé à 13,43min

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
2 Extraire les spectres à des points de données spécifiques pour le pic à 5,2min et celui à 14,3min du fichier de données Pest - STD 200 MRM.d. - Extraire un spectre du pic situé à ou proche de 5,2min, puis l'un des creux, à l'aide de l'une des options décrites sous Commentaires. - Extraire un spectre du pic situé à ou proche de 14,3minutes (pas le creux tout de suite). - Changer l'affichage afin de visualiser au moins trois spectres.	a Cliquez sur l'icône Range Select  dans la barre d'outils Chromatogram Results. b Fermez la fenêtre Spectrum Preview. c Cliquez sur l'icône Zoom Out  dans la barre d'outils Chromatogram Results. d Pour effectuer un zoom avant sur le pic à 5,2min, cliquez avec le bouton droit de la souris au-dessus du pic à 4,0min et faites glisser le pointeur jusqu'à 6,0min, puis relâchez le bouton. e Sur un pic proche de 5,2min, extrayez un spectre à l'aide de l'une des méthodes indiquées dans la colonne Remarques. f Sur un creux proche de 5,1min, extrayez le spectre. g Cliquez sur l'icône Zoom Out  dans la barre d'outils Chromatogram Results. h Effectuez un zoom sur la zone comprise entre 14 et 15minutes. i Sur un pic proche de 14,3min, extrayez un spectre à l'aide de l'une des méthodes indiquées dans la colonne Remarques (n'extrayez pas encore le spectre du creux). j Si nécessaire, sélectionnez 4 comme nombre maximum de volets liste dans la barre d'outils MS Spectrum Results.	- Lorsque vous effectuez le zoom, veillez à ce que l'icône AutoScale Y-axis during Zoom  soit sélectionnée. Le fond de l'icône est orange quand elle est active. - Vous pouvez extraire un spectre de l'une des manières suivantes: - Double-cliquez sur le point de données dans le chromatogramme. - Cliquez sur le point de données dans le chromatogramme, puis cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le chromatogramme. Cliquez sur Extract MS Spectrum. La boîte de dialogue Extract Spectrum s'ouvre. Assurez-vous que le fichier Pest - STD 200 MRM.d est sélectionné, puis cliquez sur Extract dans la boîte de dialogue Extract Spectrum. - Notez que la première fois que vous extrayez un spectre, la fenêtre MS Spectrum Results s'affiche contenant le spectre. Le type du spectre et le temps de rétention figurent sous User Spectra. Tous les spectres extraits suivants apparaissent aux deux endroits également. - Lorsque vous extrayez un spectre SM du pic proche de 14,3minutes, deux spectres sont extraits, car deux transitions se produisent sur ce pic.

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

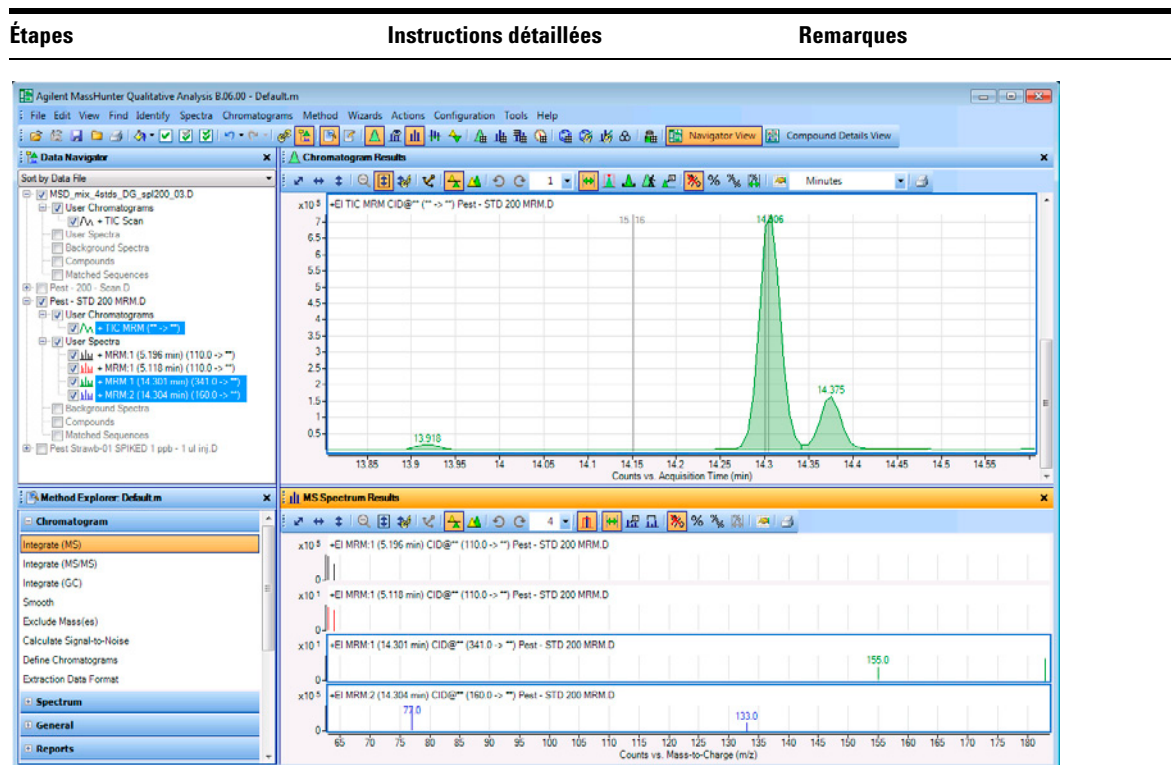


Figure 19 Fenêtre principale avec deux spectres MRM du pic situé à 5,2min et deux spectres MRM du pic situé à 14,3min

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
3 Extraire un spectreMS pour le creux situé à 14,35minutes du fichier de données Pest - STD 200 MRM.d . - Ouvrir Spectrum Preview. - Extraire un spectre du creux situé au TR 14,3min. - Copier ce spectre dans le dossier User Spectra. - Changer l'affichage pour montrer 6spectres. - Fermer Spectrum Preview.	a Cliquez sur l'icône Spectrum Preview . b Extrayez un spectre sur un creux proche de 14,3minutes. c Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre dans la fenêtre Spectrum Preview, puis cliquez sur Copy to User Spectra. Les spectres sont copiés dans la section User Spectra du navigateur de données et s'affichent dans la fenêtre MS Spectrum Results. d Cliquez sur la flèche vers le bas en regard de la liste de spectres et sélectionnez 6. e Fermez la fenêtre Spectrum Preview.	- Lorsque Spectrum Preview est activé, le système affiche tous les spectres sélectionnés manuellement dans la fenêtre Spectrum Preview, mais pas dans la section User Spectra de Data Navigator. - Avec Spectrum Preview activé, Qualitative Analysis écrase le précédent spectre lorsque vous en extrayez un nouveau. - Le mode Spectrum Preview est utile si vous souhaitez réviser rapidement les spectres dans votre chromatogramme et n'en sauvegarder que quelques-uns.

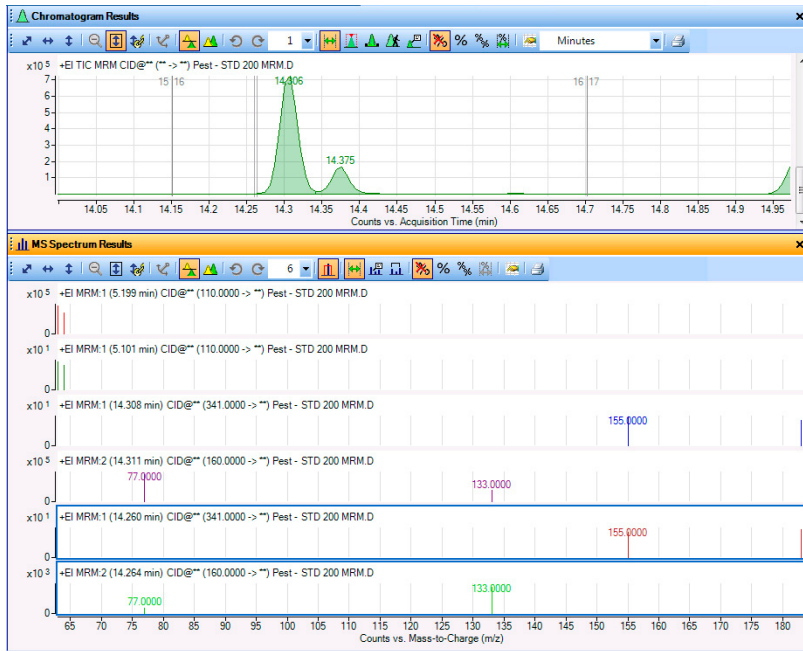


Figure 20 Fenêtres Chromatogram Results et MS Spectrum Results

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4 Extraire un spectre qui moyenne tous les points d'une plage spécifiée pour le pic de 14,3min pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d: - Effectuer un zoom arrière. - Utiliser l'icône de sélection de la plage dans la barre d'outils du chromatogramme. - Définir la plage sur la totalité du pic. - Extraire le spectre à l'aide de l'une des options indiquées.	a Cliquez sur l'icône Range Select  dans la barre d'outils du chromatogramme. b Cliquez à gauche de la base du pic à 14,3min et faites glisser le pointeur jusqu'à la droite de la base de ce même pic. c Extrayez le spectre moyen à l'aide de l'une des options indiquées à droite. d Sélectionnez 2 comme nombre maximum de volets liste dans la fenêtre Chromatogram Results.	- Vous pouvez extraire un spectre moyen en double-cliquant sur la plage sélectionnée dans le chromatogramme. - Ou, cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le chromatogramme, puis cliquez sur Extract MS Spectrum du menu contextuel. - Notez que deux spectres MRM moyennés s'affichent.

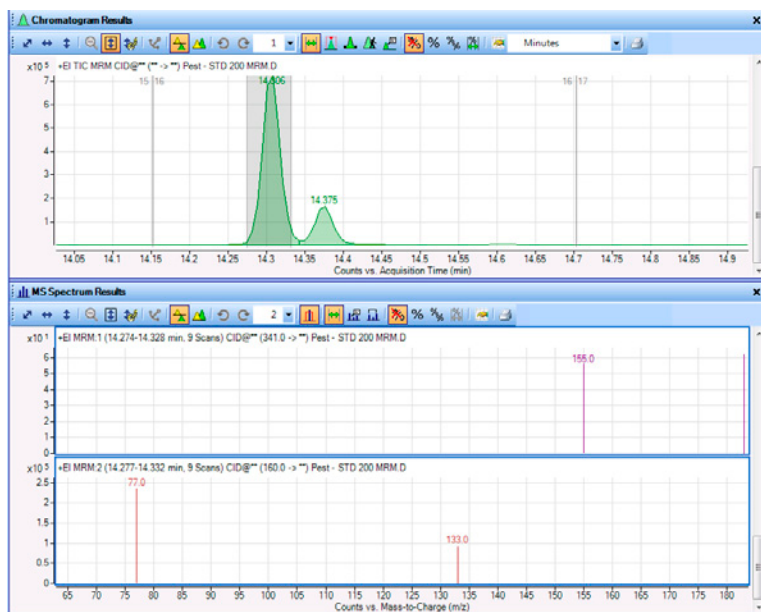


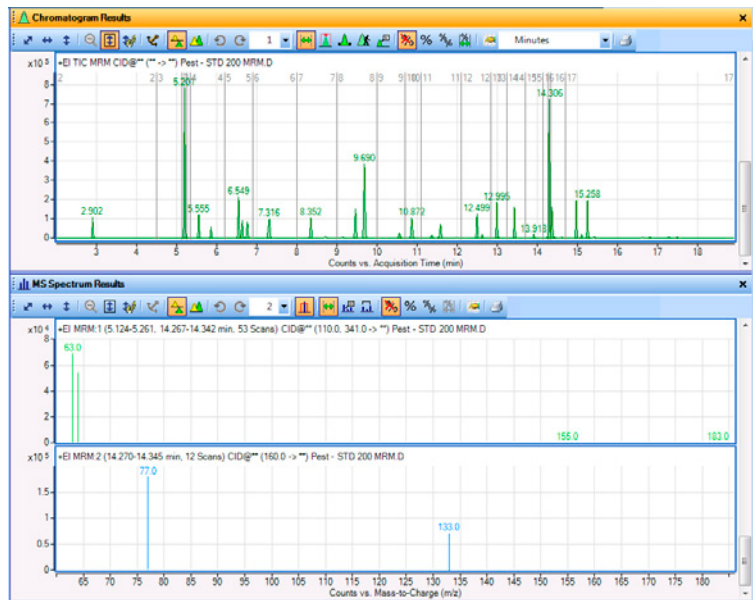
Figure 21 Fenêtres Chromatogram Results et MS Spectrum Results affichant deux spectres moyennés

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
5 Extraire des spectres qui moyennent les plages des pics situés à 5,2min et 14,3min pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d . - Astuce: utiliser l'icône Range Select et la touche Ctrl pour sélectionner la plage du pic1 à mi-parcours. - Extraire les spectres à l'aide de l'une des options indiquées à droite.	a Cliquez sur l'icône Zoom Out dans la barre d'outils Chromatogram Results. b Appuyez sur la touche Ctrl et maintenez-la enfoncée. c Cliquez à gauche du pic de 5,2min et faites glisser le pointeur à droite de ce pic, puis relâchez le bouton de la souris. d Relâchez la touche Ctrl . e Extrayez les spectres moyennés à l'aide de cette option ou de l'une de celles qui figurent à droite: Double-cliquez dans la plage sélectionnée de l'un des pics.	- N'oubliez pas qu'une plage a déjà été sélectionnée à l'étape4 pour le deuxième pic. - Pour extraire des spectres, vous pouvez également cliquer avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le chromatogramme, puis cliquer sur Extract MS Spectrum. La boîte de dialogue Extract Spectrum s'affiche. Cliquez sur Extract.



Le premier spectre comporte des transitions entre les deux plages de temps. Le deuxième spectre n'a qu'une seule plage de temps, car la transition 160.00 -> ** ne figure pas dans le pic situé à 5,2minutes.

Figure 22 Deux spectres moyennés à partir de deux plages différentes dans le chromatogramme

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
6 Soustraire un spectre de fond chaque fois que vous extrayez un spectre de pic de Pest - STD 200 MRM.d. - Supprimer tous les balayages sous User Spectra dans Data Navigator. - Extraire un spectre de fond qui est la moyenne d'un spectre au début du pic et d'un autre à la fin du pic. - Extraire un spectre de pic des pics intégrés.	a Cliquez sur la ligne User Spectra dans Data Navigator. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la ligne User Spectra, puis cliquez sur Delete. b Cliquez sur Yes. c Dans Method Explorer, sélectionnez Spectrum > Extract (MS/MS). d Cliquez sur l'onglet Peak Spectrum Extraction (MS/MS), s'il n'est pas visible. e Dans la boîte Peak spectrum background MS/MS, sélectionnez Average of spectra at peak start and end. f Dans la barre d'outils Chromatogram Results, cliquez sur l'icône Peak Select . g Cliquez sur l'option Chromatograms > Integrate. h Sélectionnez le pic à 5,206minutes. i Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez l'option Extract Peak Spectrum du menu contextuel.	Notez qu'à la fin de cette procédure, le spectre de fond désigné est automatiquement soustrait de tous les spectres de pic extraits.

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Figure 23 Spectres de pic avec spectre de fond soustrait

Tâche 9. Extraction de spectres d'un chromatogramme

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
7 Intégrer et extraire des spectres de pic du fichier de données Pest - STD 200 MRM.d.	a Cliquez sur le chromatogramme TIC MRM dans la fenêtre Data Navigator. b Cliquez sur Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.	Les spectres de pic que vous avez extraits manuellement à l'étape précédente sont automatiquement supprimés, car par défaut la case Clear previous peak spectra est cochée dans l'onglet Chromatograms > Integrate (MS/MS) > Results.

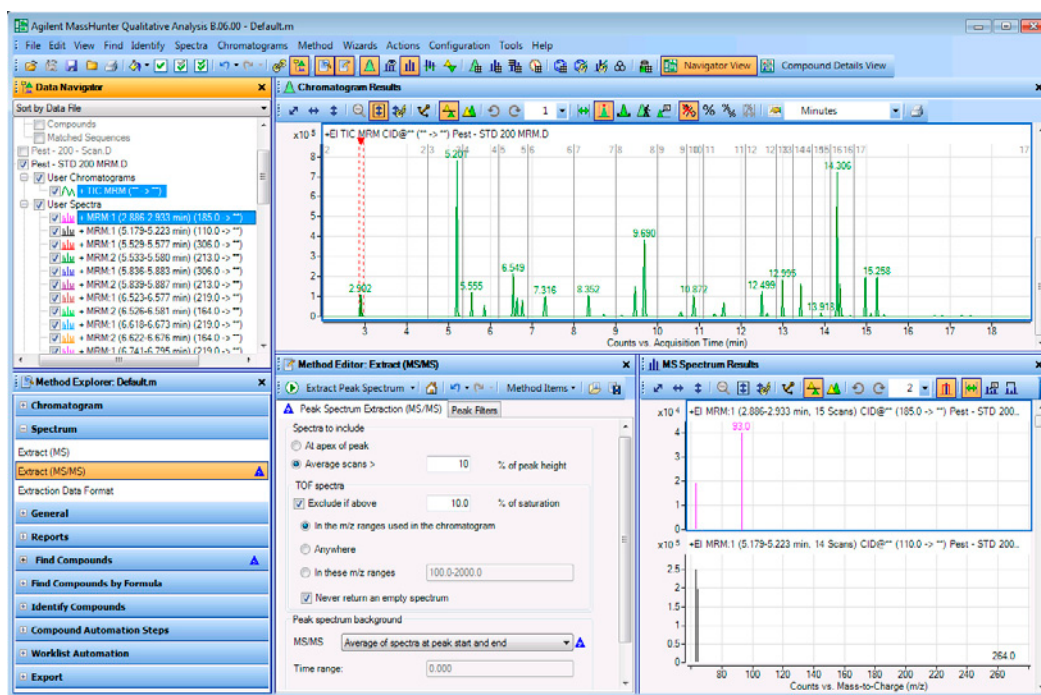


Figure 24 Intégration et extraction de spectres de pic

8 Supprimer les résultats d'intégration et les spectres de pic.	a Sélectionnez le fichier de données Pest - Std 200 MRM.d. b Cliquez sur Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.	Vous pouvez également cliquer sur Chromatograms > Clear Results > Only Chromatograms si vous ne voulez pas supprimer les spectres de pic.
---	---	--

Tâche 10. Ajout d'annotations

Vous pouvez ajouter une annotation sous forme d'image ou de texte dans les fenêtres graphiques suivantes:

- Fenêtre Chromatogram Results
- Fenêtre MS Spectrum Results

Si vous enregistrez les résultats pour le fichier de données, les annotations sont également sauvegardées.

Tâche 10. Ajout d'annotations

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Sélectionner le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Masquer les autres chromatogrammes.	a Cochez la case en regard de MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d dans la fenêtre Data Navigator. b Cliquez sur Edit > Show > Only Highlighted.	• Les chromatogrammes des autres fichiers de données sont automatiquement masqués.
2 Sélectionner l'emplacement dans le chromatogramme pour ajouter une annotation texte.	a Dans la fenêtre Chromatogram Results, cliquez sur l'outil Annotation  dans la barre d'outils. b Déplacez le curseur à l'emplacement du chromatogramme où vous souhaitez ajouter l'annotation. c Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez Add Text Annotation.	• Le curseur se transforme en réticule. Il permet de sélectionner l'emplacement exact pour l'ajout de l'annotation. • La barre d'outils Annotate est disponible dans la fenêtre Chromatogram Results. • Vous pouvez également ajouter des annotations à la fenêtre MS Spectrum Results.

Tâche 10. Ajout d'annotations (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
3	Ajouter les informations de l'annotation texte dans la boîte de dialogue Add/Edit Text Annotation. a Saisissez le texte de l'annotation. b Sélectionnez la couleur du texte (Text color). c Sélectionnez l'Orientation. d Sélectionnez le style et la taille de police (Font style et Font size). e Cliquez sur Anchored (ancré) ou Floating (flottant). Si vous cliquez sur Anchored, sélectionnez les options du pointeur pour l'annotation texte. Si vous sélectionnez Floating, vous pouvez modifier la position relative. Il est plus simple de changer la position de manière interactive dans la fenêtre de graphiques. f Cliquez sur OK.	- Vous pouvez ajouter plusieurs annotations dans un chromatogramme ou un spectre. - Utilisez les icônes de la barre d'outils Annotate pour sélectionner toutes les annotations, supprimer et éditer des annotations.

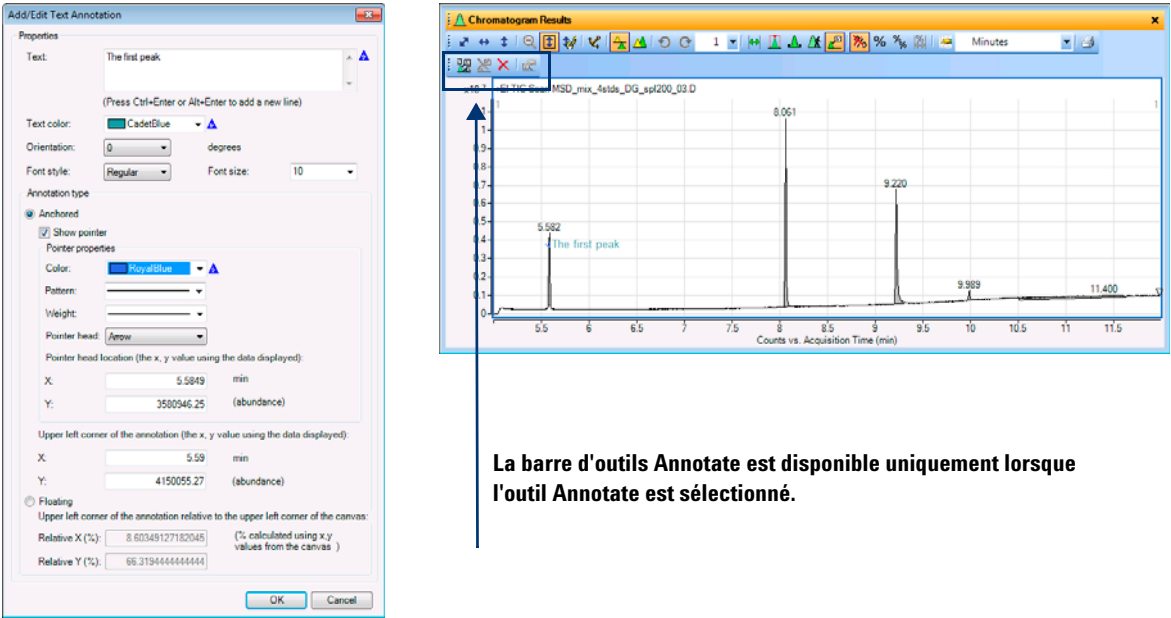


Figure 25 Boîte de dialogue Add/Edit Text Annotation et fenêtre Chromatogram Results

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 10. Ajout d'annotations

Tâche 10. Ajout d'annotations (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4 Sélectionner l'emplacement dans le chromatogramme pour ajouter une annotation image.	a Déplacez le curseur à l'emplacement du chromatogramme où vous souhaitez ajouter l'annotation. b Cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez Add Image Annotation.	Vous pouvez ajouter un fichier image JPG ou MOL.
5 Ajouter les informations de l'annotation texte dans la boîte de dialogue Add/Edit Text Annotation.	a Saisissez le texte de l'annotation. b Tapez 50 dans la boîte Scale width. c Cochez la case Lock aspect ratio. d Cliquez sur Floating. Vous pouvez changer la position relative. Il est plus simple de changer la position de manière interactive dans la fenêtre de graphiques. e Cliquez sur OK. f Déplacez l'image dans le coin supérieur droit du chromatogramme.	- Le fichier Agilent_Logo.tif réside dans le dossier \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter. Vous devez le convertir en fichier JPG. - Vous pouvez ajouter plusieurs annotations dans un chromatogramme ou un spectre.

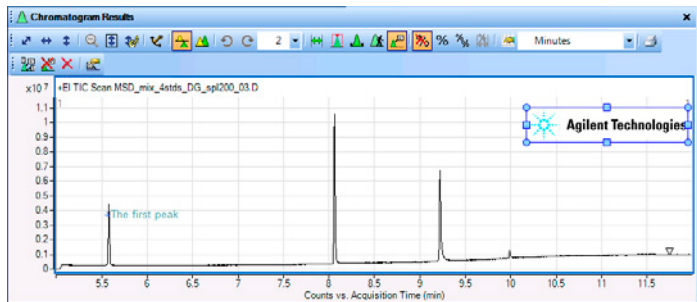
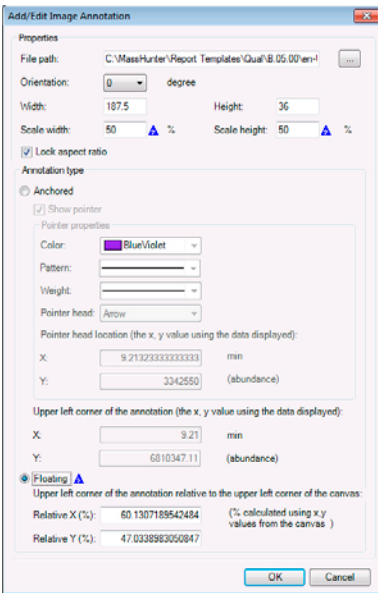
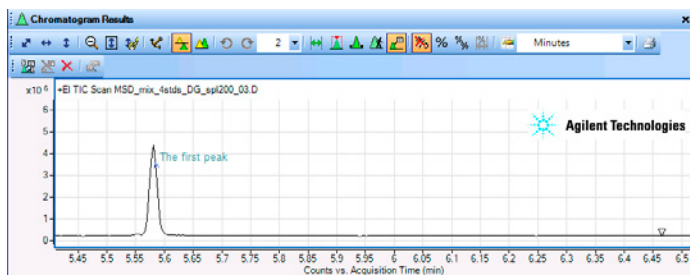


Figure 26 Boîte de dialogue Add/Edit Image Annotation et fenêtre Chromatogram Results

Tâche 10. Ajout d'annotations (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
6	Effectuer un zoom avant sur le premier pic.	• Effectuez un zoom sur une zone autour du premier pic à 5,5minutes.



Si une annotation est ancrée, elle reste fixée à la position à laquelle elle est ancrée. Si vous zoomer sur un autre pic, il se peut qu'une annotation ancrée ne soit pas visible. Si une annotation est flottante, elle est toujours affichée à la même position relative dans le coin supérieur gauche de la fenêtre.

Figure 27 Boîte de dialogue Add/Edit Image Annotation et fenêtre Chromatogram Results

7	Rebasculer sur l'outil Range Select dans la fenêtre Chromatogram Results. Supprimer d'abord l'annotation.	a Cliquez sur l'icône  pour supprimer toutes les annotations. b Cliquez sur l'icône Range Select  dans la barre d'outils Chromatogram Results. • Si vous voulez enregistrer les annotations avec les résultats du fichier de données, reportez-vous à la « Tâche 17. Enregistrement des résultats », page 72. • Vous pouvez basculer entre cinq outils différents dans la barre d'outils Chromatogram Results. Pour plus d'informations, reportez-vous à l'aide en ligne. Les cinq outils sont les suivants: • Range Select • Select Peak... • Manual Integration • Walk Chromatogram • Annotation Mouse
---	---	--

Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse

Un compas d'épaisseur (caliper) montre la différence entre deux points d'un spectre. Vous pouvez en ajouter un dans la fenêtre MS Spectrum Results.

Si vous enregistrez les résultats pour le fichier de données, les compas d'épaisseur sont également sauvegardés.

Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Intégrer et extraire des spectres de pic de MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	a Cochez la case en regard de MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d dans la fenêtre Data Navigator. b Cliquez sur Edit > Show > Only Highlighted. c Cliquez sur Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra. d Fermez la fenêtre Method Editor.	
2 Ajouter le compas d'épaisseur au spectre de pic créé au cours de la précédente tâche.	a Dans la fenêtre MS Spectrum Results, cliquez sur l'outil Delta Mass Caliper  dans la barre d'outils. b (facultatif) Sélectionnez Profile Point to Point pour le type de compas d'épaisseur dans la barre d'outils Caliper. c Effectuez un zoom avant de 66 à 132 m/z. d Déplacez le curseur à l'emplacement du volet du spectre où vous souhaitez ajouter le compas d'épaisseur. e Faites glisser le curseur jusqu'au point final du compas dans le spectre. À mesure que vous faites glisser le curseur, la valeur de masse Delta change. Lorsque vous relâchez le bouton de la souris, le compas d'épaisseur est ajouté.	• Le curseur se change en flèche. Il permet de sélectionner le point de début et le point de fin du compas d'épaisseur. • Vous ne pouvez pas sélectionner le type de compas d'épaisseur si le spectre est centré, car Profile Point to Point n'a pas d'effet sur les données centrées. • Le curseur triangle est défini en haut du pic sélectionné.

Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse (suite)

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
3	Modifier le compas d'épaisseur pour utiliser une autre couleur. a Cliquez sur le compas d'épaisseur créé à l'étape précédente. b Cliquez sur le bouton Caliper Properties  dans la barre d'outils MS Spectrum Results Caliper. c (facultatif) Entrez les valeurs de Start X et Start Y. d Sélectionnez la couleur du texte (Text color). e Sélectionnez le style et la taille de police (Font style et Font size). f Cliquez sur OK.	- Vous pouvez ajouter plusieurs compas d'épaisseur à un spectre. - Utilisez les icônes de la barre d'outils Caliper pour sélectionner tous les compas d'épaisseur, supprimer et éditer des compas d'épaisseur.

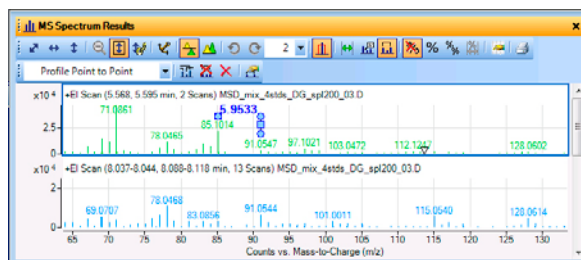
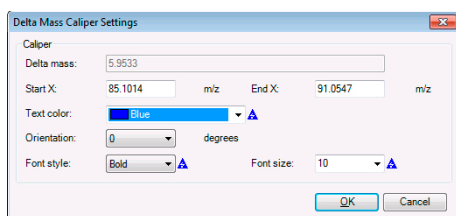
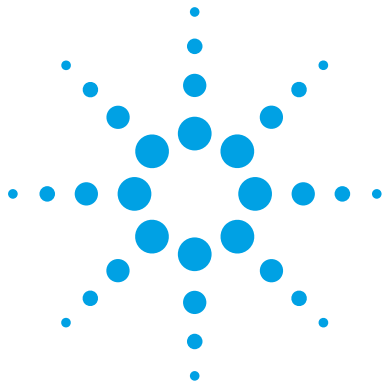


Figure 28 Boîte de dialogue Delta Mass Caliper Settings et fenêtre MS Spectrum Results

4	Supprimer des résultats d'intégration et des spectres. a Cliquez sur Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra. b Cliquez sur l'outil Range Select.	Si vous voulez enregistrer les compas d'épaisseur avec les résultats du fichier de données, reportez-vous à la « Tâche 17. Enregistrement des résultats », page 72.
---	---	---

1 Apprendre les bases de l'analyse qualitative

Tâche 11. Ajout d'un compas d'épaisseur de masse



2 Détection et identification

- Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme 50
- Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque 54
- Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement) 59
- Tâche 15. Détection de composés par intégration 63
- Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic 66
- Tâche 17. Enregistrement des résultats 72

Au cours de ces tâches, vous allez détecter et identifier des composés dans des fichiers de données CPG/SM.

Chaque exercice est présenté dans un tableau à trois colonnes:

- Étapes: utilisez ces instructions générales afin d'explorer le programme par vous-même.
- Instructions détaillées: utilisez-les si vous avez besoin d'aide ou si vous préférez suivre une méthode d'apprentissage pas à pas.
- Remarques: lisez-les pour obtenir des astuces et des informations supplémentaires sur chaque étape de l'exercice.



Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme

L'algorithme de détection des composés identifie les composés dans des données CPG/SM et crée un spectre SM nettoyé pour chaque composé. Cette fonctionnalité est un moyen simple d'analyser les informations de données complexes. L'algorithme de détection de composés par dévolution de chromatogramme ne peut être utilisé que sur des échantillons de données CPG/SM acquises en mode Scan, Product Ion scan ou Neutral Loss scan.

Cette tâche explique la détection de composés par déconvolution de chromatogramme avec des données de masse précises. Vous pouvez également détecter des composés par déconvolution de chromatogramme avec des données de masse unitaire après avoir au préalable changé la fenêtre d'extraction.

Tâche 12. Détection de composés à l'aide de la déconvolution de chromatogramme (CPG/SM)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	• L'algorithme de détection des composés par déconvolution de chromatogramme fonctionne avec des fichiers de données CPG/QQQ et CPG/Q-TOF.

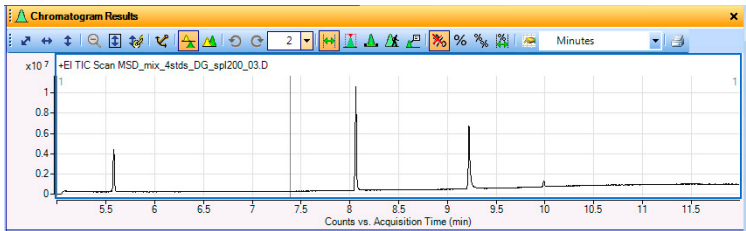


Figure 29 Chromatogramme CIT à partir de Pest - 200 - Scan.d

Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme

Tâche 12. Détection de composés à l'aide de la déconvolution de chromatogramme (CPG/SM)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
2 Configurer l'interface utilisateur pour travailler avec des données CPG.	Suivez les instructions de la « Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM », page 13.	Pour ces exemples, chargez le flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening.
3 Détecter des composés à l'aide de l'algorithme de déconvolution de chromatogramme. - Sélectionner l'intégrateur Agile. - Entrer un seuil SNR de 20. - Entrer 100ppm comme valeur de Left m/z delta et Right m/z delta.	- Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Find Compounds > Find by Chromatogram Deconvolution. - Dans l'onglet Settings sous Peak filter, tapez 20 comme valeur de SNR threshold. - Sélectionnez PPM pour m/z delta units. - Entrez 100 pour Left m/z delta et 100 également pour Right m/z delta.	- La section Find by Chromatogram Deconvolution est également disponible dans la section GC/Q-TOF Compound Screening. - Si vous disposez de données de masse unitaire, entrez 0.3 AMU comme valeur de Left m/z delta et 0.7 AMU pour Right m/z delta. - Vous pouvez extraire l'ensemble des résultats complets pour un composé une fois détecté à l'aide de l'option de menu Compounds > Extract Complete Result Set lorsqu'un composé est sélectionné.

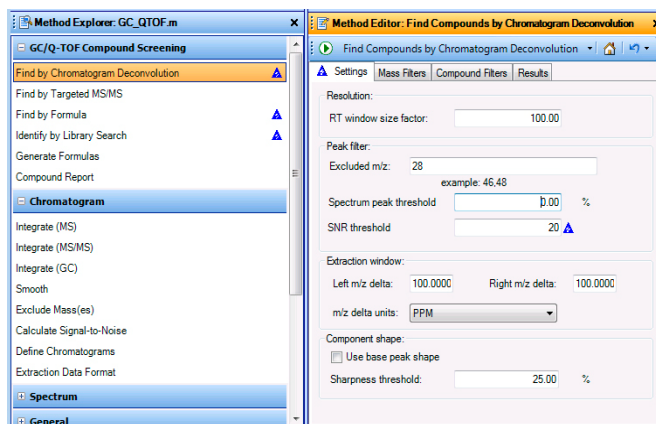


Figure 30 Onglet Settings dans la section Find by Chromatogram Deconvolution

2 Détection et identification

Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme

Tâche 12. Détection de composés à l'aide de la déconvolution de chromatogramme (CPG/SM)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
Sélectionner pour extraire des spectres CIE, SM et SM/SM.	e Cliquez sur l'onglet Results. f Cochez les cases Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum et Extract raw spectrum. g Cliquez sur  pour exécuter l'algorithme Find Compounds by Chromatogram Deconvolution sur le fichier de données. h Si nécessaire, cliquez sur l'option View > Compound List.	- Le programme d'analyse qualitative détecte 4 composés répondant aux conditions. - Si le fichier de données n'est pas indexé, l'exécution de l'algorithme peut prendre beaucoup de temps.
4 Examiner les composés. Voir la Figure 31 , page 53.	a Sélectionnez 2 comme nombre maximum de volets liste dans la barre d'outils MS Spectrum Results. b Cliquez sur l'icône Hide Empty Columns dans la fenêtre Compound List. c Cliquez sur le premier composé dans la fenêtre Data Navigator. d Lorsque la fenêtre Data Navigator est active, utilisez les touches fléchées pour passer d'un composé à l'autre.	- L'affichage des deux spectres est un bon moyen pour montrer toutes les informations d'un seul composé. - Notez que le spectre nettoyé et le spectre brut sont affichés.

Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme

Tâche 12. Détection de composés à l'aide de la déconvolution de chromatogramme (CPG/SM)

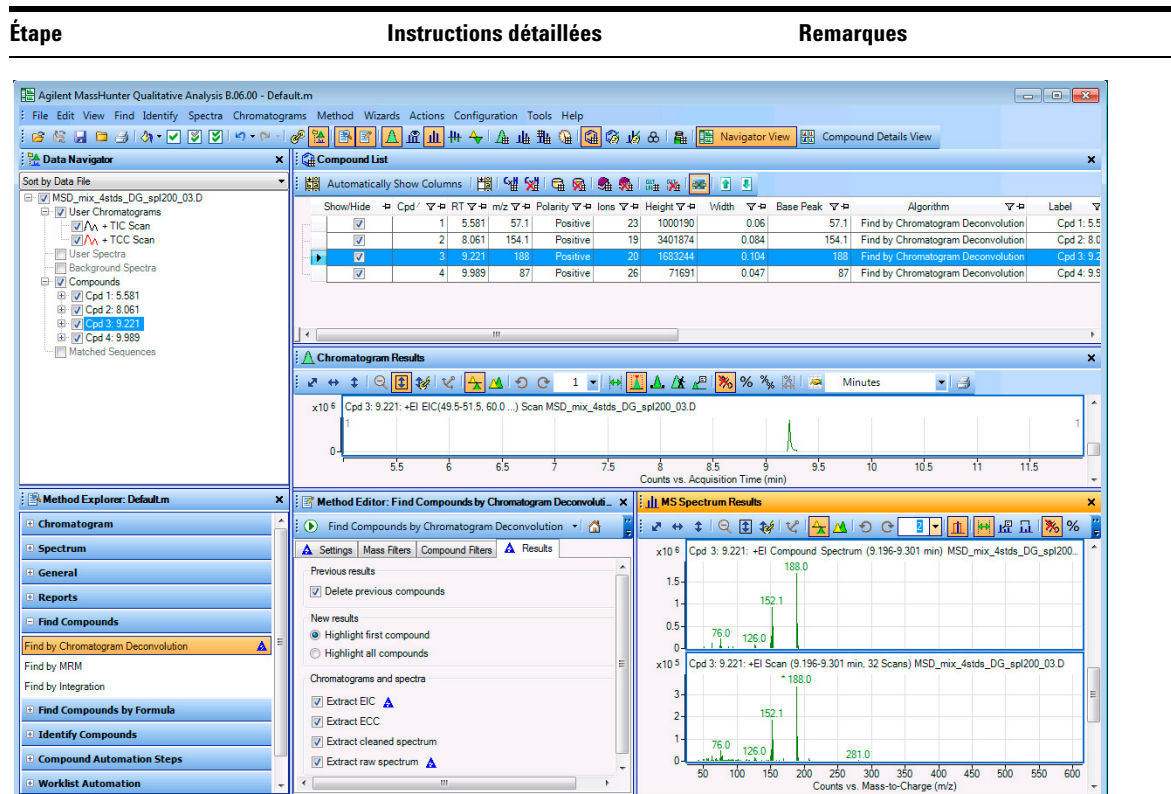


Figure 31 Résultats de la détection de composés par déconvolution de chromatogramme

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Au cours de cette tâche, vous allez identifier et générer des formules pour les composés détectés au cours de la « [Tâche 12. Détection de composés par déconvolution de chromatogramme](#) », page 50. Vous pouvez exécuter cette tâche si vous avez fait l'acquisition de la bibliothèque *NIST08.l* ou si vous utilisez la bibliothèque *demo.l*. Si vous disposez de deux bibliothèques, vous pouvez même sélectionner les deux.

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Effectuer une recherche en librairie de tous les composés dans le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	a Sélectionnez les composés dans le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D dans la fenêtre Data Navigator. b Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Identify Compounds > Search Unit Mass Library. c Dans l'onglet Settings, cliquez sur le bouton Add Library. Sélectionnez la bibliothèque demo.l et cliquez sur le bouton OK. d (facultatif) Dans l'onglet Settings, cliquez sur le bouton Add Library. Sélectionnez la bibliothèque NIST08.l et cliquez sur le bouton OK. e Cliquez sur l'onglet Search Results. f (facultatif) Sélectionnez Stop When Found pour Multi-Library search type. g Cliquez sur Identify > Search Library for Compounds dans le menu principal. Vous pouvez également cliquer sur l'icône Search Library for Compounds  pour exécuter l'algorithme. h Cliquez sur View > Difference Results. i Cliquez sur View > Structure Viewer. j Cliquez sur View > Compound Identification Results, si nécessaire pour afficher la fenêtre. k Le cas échéant, cliquez sur l'onglet permettant d'afficher la fenêtre Compound Identification Results. L'onglet correspondant est accessible dans la fenêtre Chromatogram Results.	- Vous pouvez également cliquer sur GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search dans Method Explorer. La même section s'affiche dans la fenêtre Method Editor. - Demo.l et Nist08 doivent être installés dans le dossier \ MassHunter\Library. - Notez que de nombreux composés sont identifiés après la recherche dans la bibliothèque <i>NIST08.l</i>. - Si vous ne disposez pas de la bibliothèque <i>NIST08.l</i>, sélectionnez une autre bibliothèque si vous en avez une de disponible. - Si vous avez deux ou plusieurs bibliothèques sélectionnées et que vous sélectionnez Stop When Found, l'algorithme de recherche en bibliothèque recherche dans la première bibliothèque de la liste. Si le composé est identifié, la recherche s'arrête. Si le composé n'est pas identifié, la recherche se poursuit dans la bibliothèque suivante jusqu'à ce qu'il soit identifié ou que la dernière bibliothèque ait été consultée. - Le programme Library Editor permet de modifier les bibliothèques que vous utilisez avec l'algorithme Search Unit Mass Library. Ce programme est installé avec le programme Agilent MassHunter Quantitative Analysis. Cliquez sur l'icône  pour démarrer le programme.

2 Détection et identification

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Étape	Instructions détaillées	Remarques
2	Afficher les colonnes Spectral Library Results dans la fenêtre Compound List et la fenêtre Compound Identification Results. a Cliquez sur le bouton Show Library Search Columns  dans la barre d'outils Compound List et dans la barre d'outils Compound Identification Results. b Cliquez sur le bouton Hide Empty Columns button  dans la barre d'outils Compound List et dans la fenêtre Compound Identification Results.	

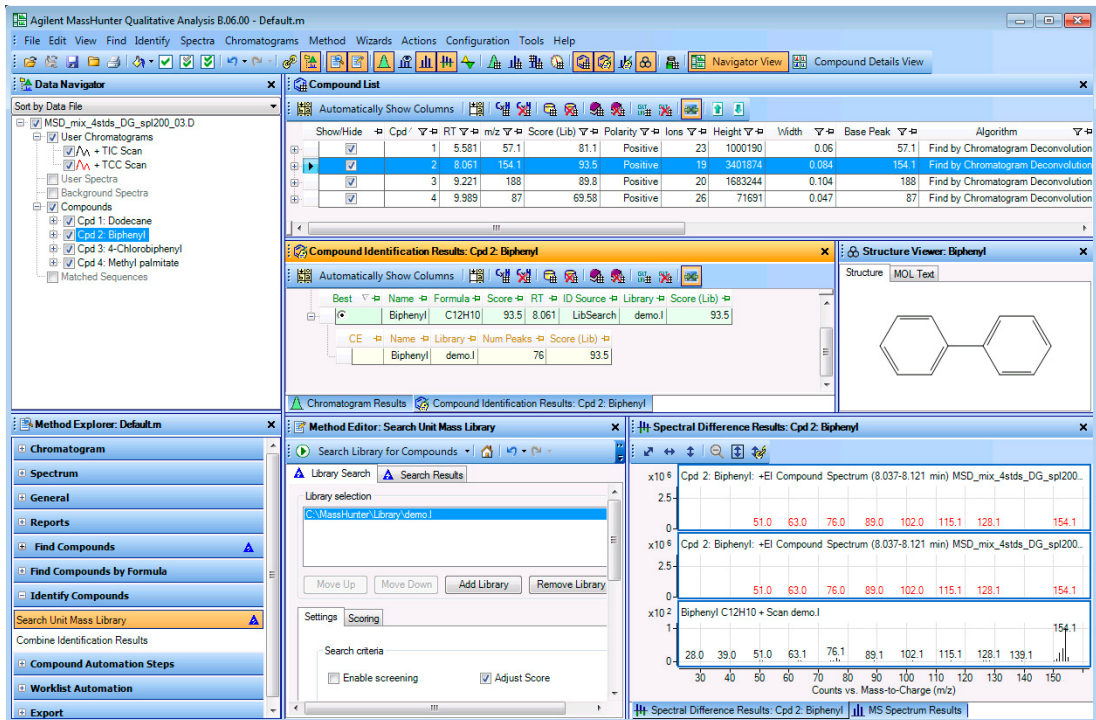


Figure 32 Composés du fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D et résultats de la recherche en bibliothèque

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Étape	Instructions détaillées	Remarques
3 Basculer vers Compound Details View pour réviser les composés.	a Cliquez sur  Compound Details View dans la barre d'outils principale. b Fermez la fenêtre Compound Fragment Spectrum Results.	
4 Réviser les résultats dans Compound Details View.	a Cliquez sur l'icône Overlaid dans la fenêtre Compound Chromatogram Results. b Développez les résultats dans la fenêtre Compound Identification Results.	Pour obtenir plus de détails sur Compound Details View, consultez l'aide en ligne. La vue Compound Details View est très utile pour examiner les résultats de l'algorithme Find by Formula avec un fichier de données acquis en mode All Ions.

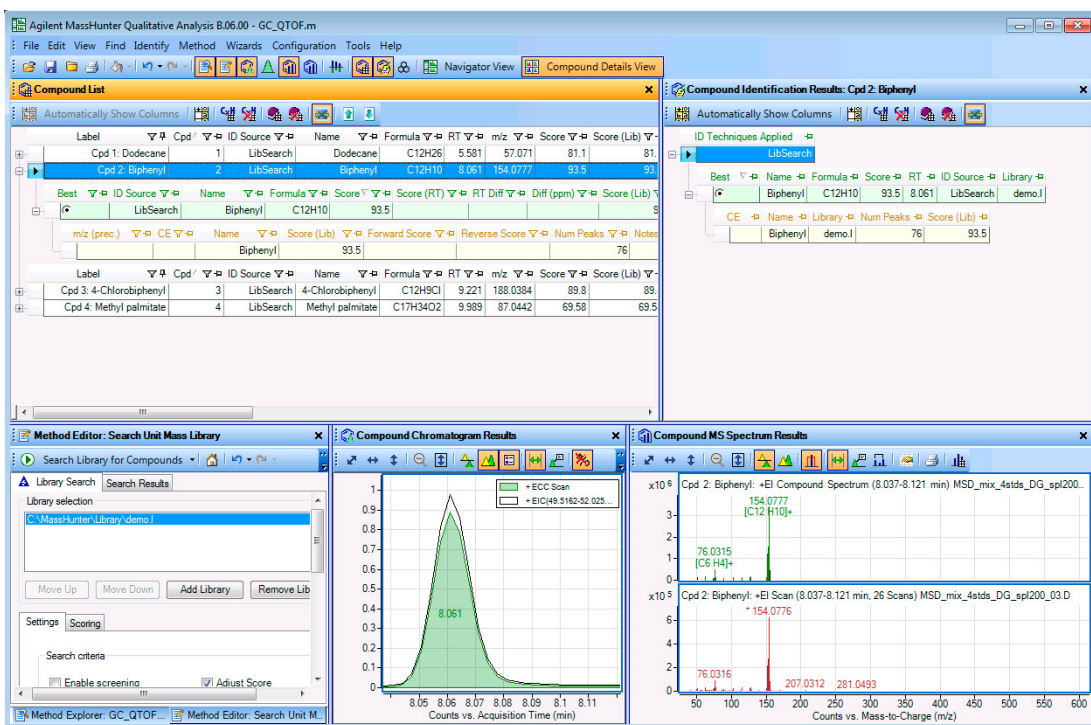


Figure 33 Compound Details View montrant les composés du fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D

2 Détection et identification

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Tâche 13. Identification de composés à l'aide de l'algorithme de recherche en bibliothèque

Étape	Instructions détaillées	Remarques
5 Rebasculer vers Navigator View.	• Cliquez sur le bouton  Compound Details View dans la barre d'outils principale.	
6 Fermer le fichier de données.	- a Cliquez sur File > Close Data File. - b Cliquez sur No.	• Si vous souhaitez enregistrer ces résultats, reportez-vous à la « Tâche 17. Enregistrement des résultats », page 72.

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

L'algorithme Find Compounds by MRM identifie les composés dans des données MRM à partir d'un dispositif Triple Quadrupôle. L'algorithme recherche les composés à l'aide de transitions MRM. Tous les composés dans la méthode d'acquisition sont extraits et affichés dans la liste Compound List. Les composés ne sont pas éliminés en fonction des résultats d'intégration du chromatogramme. Vous ne pouvez utiliser l'algorithme Find Compounds by MRM que sur des données acquises à l'aide de transitions MRM. L'algorithme MRM utilise des informations trouvées dans le fichier de données si celui-ci est de type MRM.

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d .	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d dans le dossier du fichier d'exemples de données GC. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	Utilisez le flux de travaux général (General Workflow) pour travailler avec des données CPG/QQQ. Vous pouvez utiliser ce même flux de travaux ou celui de criblage des composés CPG/Q-TOF pour travailler avec des données CPG/Q-TOF.

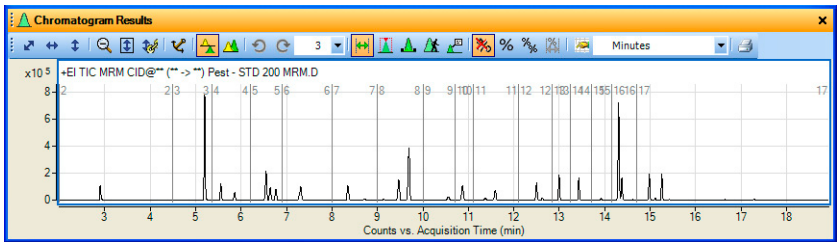


Figure 34 Chromatogramme CIT à partir de Pest - STD 200 MRM.d

2 Configurer l'interface utilisateur pour travailler avec des données CPG.	Suivez les instructions de la « Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM », page 13.
--	---

2 Détection et identification

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
3 Détecter des composés à l'aide de l'algorithme MRM.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Find Compounds > Find by MRM. b Cliquez sur le bouton Group transitions by compound name. c Cliquez sur l'onglet Integrator. d Sélectionnez l'intégrateur Agile.	- Vous pouvez choisir la zone du chromatogramme dans laquelle vous envisager de détecter des composés. - Vous pouvez extraire l'ensemble des résultats complets pour un composé une fois détecté à l'aide de l'option de menu Compounds > Extract Complete Result Set lorsqu'un composé est sélectionné.

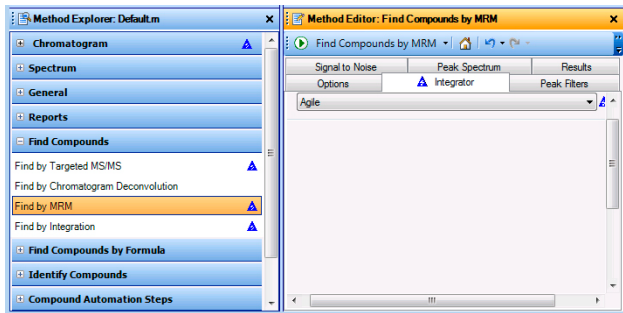


Figure 35 Onglet Integrator dans la section Find by MRM de Method Editor

- e Cliquez sur  pour exécuter l'algorithme **Find Compounds by MRM** sur le fichier de données.
- f Si nécessaire, cliquez sur l'option **View > Compound List**.
- g Si nécessaire, cliquez sur **View > Compound Identification Results**.
- Le programme d'analyse qualitative détecte 28 composés répondant aux conditions.

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
4 Examiner les composés. Voir la Figure 36, page 61.	a Sélectionnez 2 comme nombre maximum de volets liste dans la barre d'outils MS Spectrum Results. b Cliquez sur l'icône Automatically Show Columns dans la fenêtre Compound List et dans la fenêtre Compound Identification Results. c Cliquez sur le premier composé dans la fenêtre Data Navigator. d Lorsque la fenêtre Data Navigator est active, utilisez les touches fléchées pour passer d'un composé à l'autre.	• L'ion précurseur est affiché dans la colonne Precursor (Acq Method) et l'ion produit dans la colonne Product (Acq Method) dans la fenêtre Compound Identification Results.

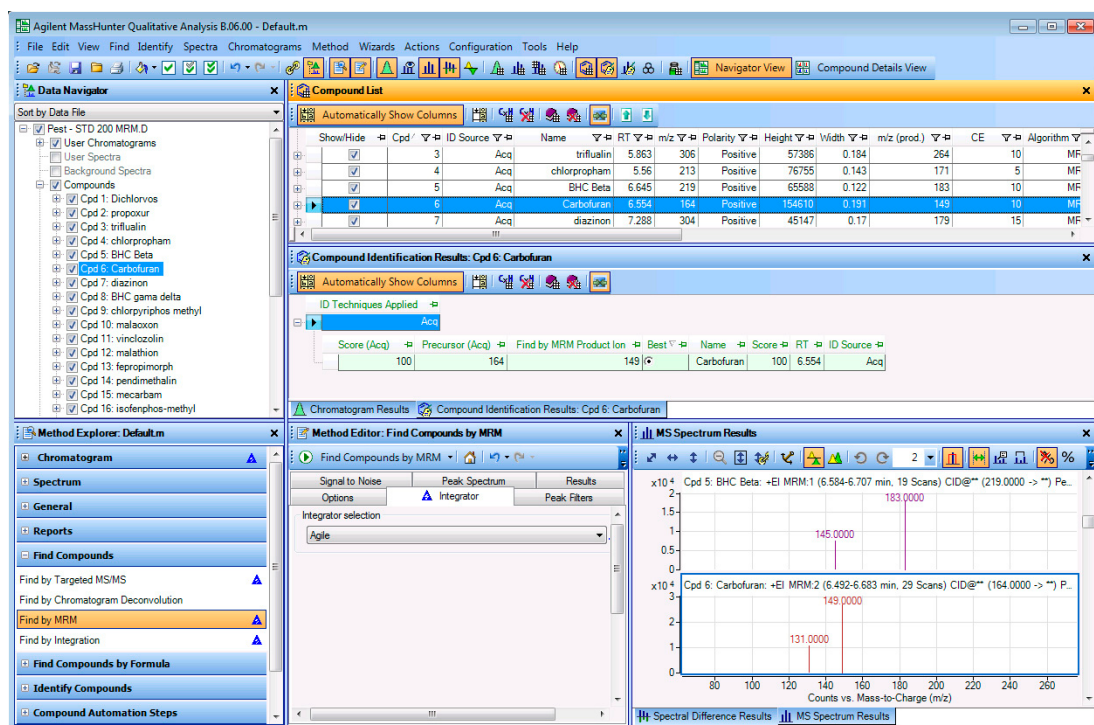


Figure 36 Résultats de la détection par MRM

2 Détection et identification

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Tâche 14. Détection de composés par MRM (MRM uniquement)

Étape	Instructions détaillées	Remarques
5 Fermer le fichier de données.	a Cliquez sur File > Close Data File . b Cliquez sur Close .	• Si vous souhaitez enregistrer ces résultats, reportez-vous à la « Tâche 17. Enregistrement des résultats », page 72.

Tâche 15. Détection de composés par intégration

L'algorithme Find Compounds by Integration identifie les composés en fonction des résultats d'intégration. Un composé est créé pour chaque pic identifié par l'intégrateur.

Tâche 15. Détection de composés par intégration

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D .	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d dans le dossier du fichier d'exemples de données GC. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	Utilisez le flux de travaux général (General Workflow) pour travailler avec des données CPG/QQQ. Vous pouvez utiliser ce même flux de travaux ou celui de criblage des composés CPG/Q-TOF pour travailler avec des données CPG/Q-TOF.

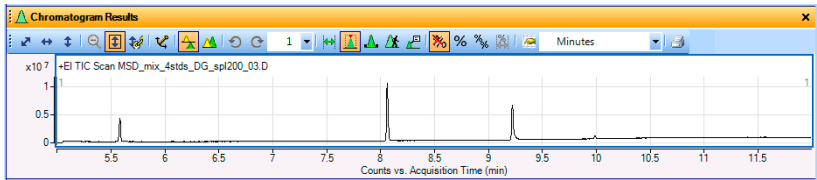


Figure 37 Chromatogramme CIT tiré de MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2 Configurer l'interface utilisateur pour travailler avec des données CPG.	Suivez les instructions de la « Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM », page 13.
3 Détecter des composés à l'aide de l'algorithme d'intégration.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Find Compounds > Find by Integration. b Sélectionnez l'intégrateur MS/MS (GC). - Vous pouvez choisir la zone du chromatogramme dans laquelle vous envisager de détecter des composés. - Vous pouvez extraire l'ensemble des résultats complets pour un composé une fois détecté à l'aide de l'option de menu Compounds > Extract Complete Result Set lorsqu'un composé est sélectionné.

2 Détection et identification

Tâche 15. Détection de composés par intégration

Tâche 15. Détection de composés par intégration

Étape	Instructions détaillées	Remarques
-------	-------------------------	-----------

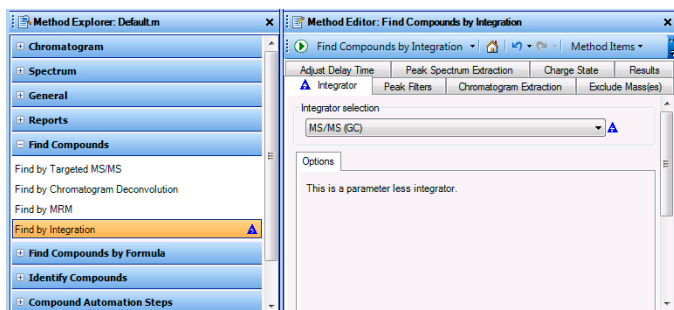


Figure 38 Onglet Integrator dans la section Find by Integration de Method Editor

- | | |
|--|---|
| <p>c Cliquez sur  pour exécuter l'algorithme Find Compounds by Integration sur le fichier de données.</p> <p>d Si nécessaire, cliquez sur l'option View > Compound List.</p> | <ul style="list-style-type: none">• Le programme d'analyse qualitative détecte 6 composés répondant aux conditions. |
|--|---|
-
- | | |
|--|---|
| <p>4 Examiner les composés. Voir la Figure 36, page 61.</p> | <p>a Sélectionnez 2 comme nombre maximum de volets liste dans la barre d'outils MS Spectrum Results.</p> <p>b Cliquez sur l'icône Automatically Show Columns dans la fenêtre Compound List.</p> <p>c Cliquez sur le premier composé dans la fenêtre Data Navigator.</p> <p>d Lorsque la fenêtre Data Navigator est active, utilisez les touches fléchées pour passer d'un composé à l'autre.</p> |
|--|---|

Tâche 15. Détection de composés par intégration

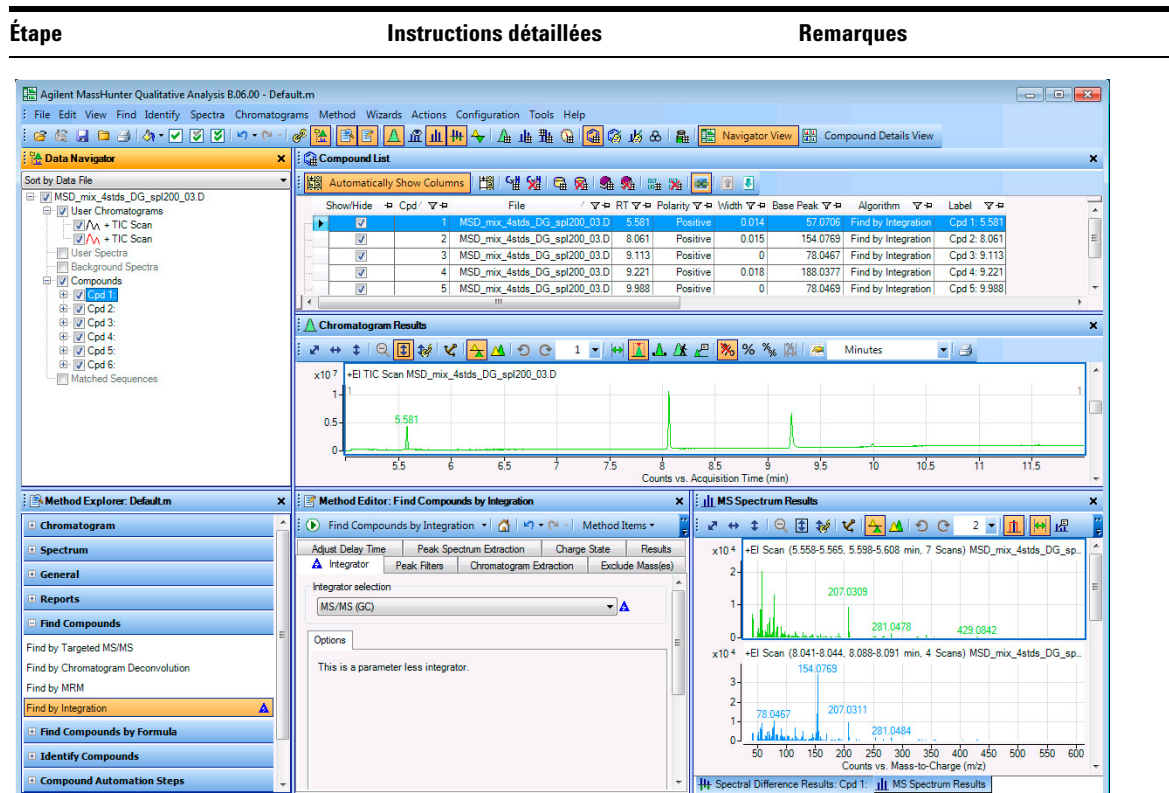


Figure 39 Résultats de la détection par intégration

- 5 Fermer le fichier de données.
 - a Cliquez sur **File > Close Data File.**
 - b Cliquez sur **Close.**
- Si vous souhaitez enregistrer ces résultats, reportez-vous à la « **Tâche 17. Enregistrement des résultats** », page 72.

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Au cours de cette tâche, vous allez d'abord intégrer et extraire des spectres de pic du fichier de données CPG/Q-TOF. Ensuite, vous allez générer des formules possibles pour chacun des spectres de pic.

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	• Si cette case n'est pas disponible, cela signifie qu'aucun résultat n'a été enregistré dans le fichier de données. Pour plus d'instructions sur l'enregistrement des résultats, se reporter à la « Tâche 17. Enregistrement des résultats », page 72.
2 Intégrer et extraire des spectres de pic.	a Cliquez dans la section Chromatogram > Integrate (MS) de la fenêtre Method Explorer. b Cliquez sur l'onglet Peak Filters. c Cliquez sur le bouton Peak height. d Cochez la case Relative height. e Cochez la case Limit (by height) to the largest et tapez 4. f Cliquez sur Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.	

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape	Instructions détaillées	Remarques
3 Générer des formules pour chacun des spectres de pic. - Afficher la liste Spectrum Identification Results List. - Fermer la fenêtre MS Spectrum Results. Astuce: pour obtenir les mêmes résultats que dans la Figure 41, veillez à sélectionner Common organic molecules comme modèle Isotope.	a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Identify Compounds > Generate Formulas. b Dans la fenêtre Method Editor, cliquez sur l'onglet Charge State et sélectionnez Common organic molecules comme modèle Isotope. c Dans la fenêtre Data Navigator, sélectionnez tous les spectres dans la section User Spectra. d Cliquez sur l'option Identify > Generate Formulas from Spectrum Peaks ou sur le bouton Generate Formulas from Spectrum Peaks  pour exécuter l'algorithme. e Si nécessaire, cliquez sur l'icône Spectrum Identification Results , ou sur l'option View > Spectrum Identification Results. f Dans la fenêtre Spectrum Identification Results, cliquez sur le bouton Automatically Show Columns dans la barre d'outils. g Cliquez sur l'icône Hide Empty Columns  dans la fenêtre Spectrum Identification Results. h Sélectionnez C6 H13 comme meilleur (Best) résultat. i Développez le tableau pour cette ligne. j Fermez la fenêtre Method Editor. k Révissez la formule et l'espèce de l'ion indiquées au-dessus de nombreux pics dans la fenêtre MS Spectrum Results. Toutes les formules et les espèces d'ions sont de la même couleur que le spectre.	- Vous pouvez voir les rapports des teneurs isotopiques prévus sur le tracé du spectre lorsque vous effectuez un zoom avant sur le rapport m/z approprié. Pour plus d'informations, consultez l'aide en ligne. - L'icône Run  de la barre d'outils Method Editor vous permet parfois de choisir une action parmi plusieurs actions possibles. Par exemple, deux actions différentes sont possibles lorsque vous cliquez sur l'icône Run dans cette section. Si vous cliquez sur la flèche, une liste d'actions possibles s'affiche et vous pouvez choisir l'action à exécuter. Le fait de choisir une autre action dans la liste change l'action par défaut. Si vous cliquez simplement sur le bouton Run, l'action par défaut est effectuée. - Vous pouvez modifier la largeur d'une colonne en tirant sur la ligne qui sépare deux colonnes adjacentes. - Vous pouvez modifier une colonne en tirant sur l'en-tête de la colonne. - Pour supprimer une colonne, cliquez sur Remove column dans le menu contextuel du tableau.

2 Détection et identification

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape

Instructions détaillées

Remarques

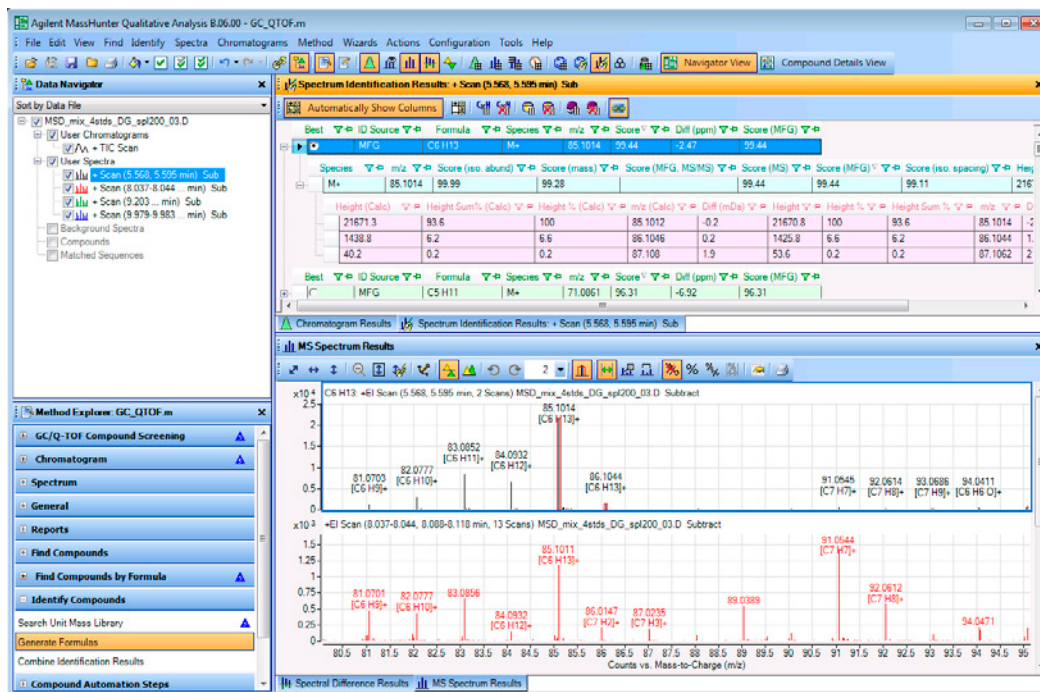


Figure 40 Résultats de la génération de formules pour les pics 1 à 4

4 Exécuter une recherche en librairie pour les spectres de pic 1 à 4.

- Dans la fenêtre Data Navigator, cliquez sur **User Spectra**.
- Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur **Identify Compounds > Search Unit Mass Library**.
- Vérifiez qu'une bibliothèque valide est sélectionnée.
- Cliquez sur **Identify > Search Library for Spectra** dans le menu principal.
- Fermez la fenêtre Method Editor.

• Method Editor s'ouvre automatiquement lorsque vous cliquez sur une section de Method Explorer.

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape	Instructions détaillées	Remarques
5 Modifier les colonnes visibles.	a Cliquez avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre Spectrum Identification Results et sélectionnez Add/Remove Columns. Dans la boîte de dialogue Enhanced) Add/Remove Columns, sélectionnez les colonnes à afficher. Cliquez sur OK. b Fermez la fenêtre Method Editor. c Cliquez sur l'icône Hide Empty Columns  dans la fenêtre Spectrum Identification Results. d Réviser la formule et l'espèce de l'ion indiquées au-dessus de chaque pic dans la fenêtre MS Spectrum Results.	• Si vous utilisez l'option Remove Column et supprimez une colonne qui contient des données, le logiciel réaffiche automatiquement cette colonne si la fonction Automatically Show Columns est activée. • L'algorithme LibSearch est largement pondéré dans la section Combine Identification Results de la méthode. Vous pouvez choisir manuellement le meilleur résultat MFG ou modifier la combinaison des résultats d'identification.

2 Détection et identification

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape

Instructions détaillées

Remarques

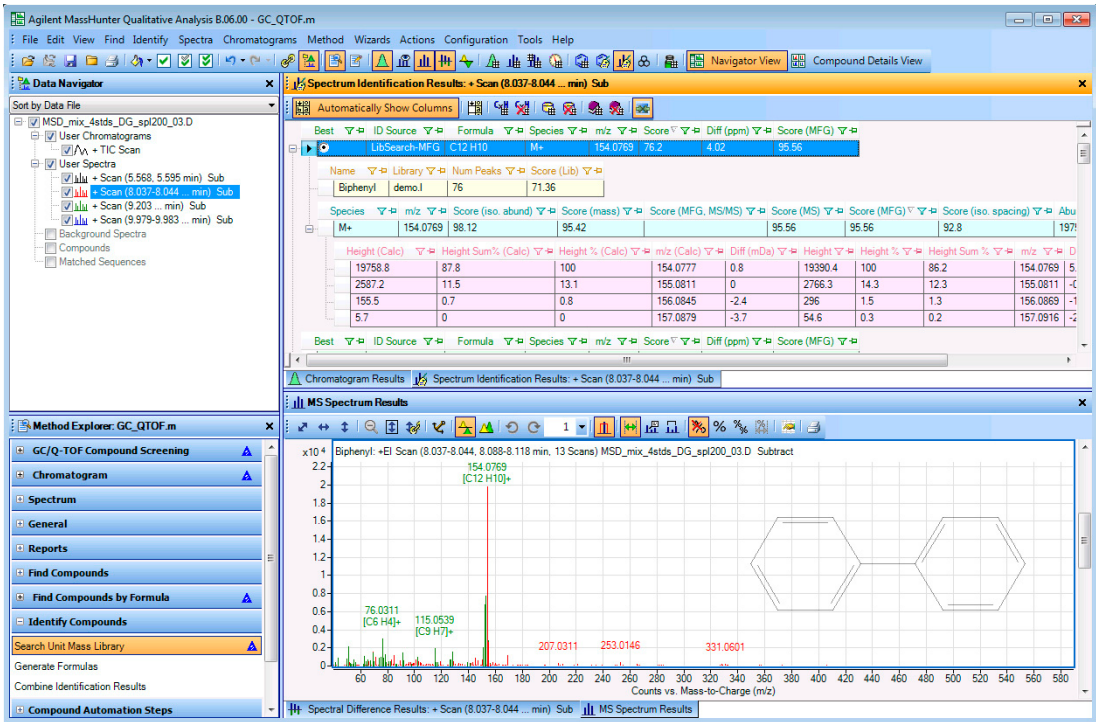


Figure 41 Résultats de la recherche en bibliothèque et de la génération de formules pour le premier spectre de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Tâche 16. Génération de formules et recherche en bibliothèque pour des spectres de pic

Étape	Instructions détaillées	Remarques
6 Réviser les résultats de chaque spectre dans la fenêtre MS Peaks One.	a Cliquez sur View > MS Spectrum Peak List 1. b Cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez Add/Remove Columns. c Vérifiez que les colonnes affichées dans la Figure 42 figurent dans la liste Show these columns. d Triez la colonne Ion Type. e Si le type d'ion est Fragment Ion, la formule et l'espèce de l'ion s'affichent en vert sur chaque pic dans la fenêtre MS Spectrum Results.	- Les ions fragments s'affichent en vert dans la fenêtre MS Spectrum Results. - Le type d'ion peut être Molecular Ion, Fragment Ion ou vide. S'il s'agit d'un ion fragment, les colonnes Loss Formula et Loss Mass affichent la formule et la masse à prendre en compte pour arriver à cet ion à partir de l'ion moléculaire. La colonne Formula & Ion Species indique la formule et l'espèce pour l'ion en question.

m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion
155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion
156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion
62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H1	85	Fragment Ion
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

Figure 42 Tableau MS Peaks One avec les colonnes **Ion Type**, **Loss Formula**, **Loss Mass** et **Formula & Ion Species**

- 7 (facultatif) Fermer le fichier de données.
- Vous pouvez passer à la tâche suivante pour savoir comment enregistrer les résultats.
- a** Cliquez sur **File > Close Data File**.
- b** Cliquez sur **Close**.
- Si vous souhaitez enregistrer ces résultats, reportez-vous à la « [Tâche 17. Enregistrement des résultats](#) », page 72.

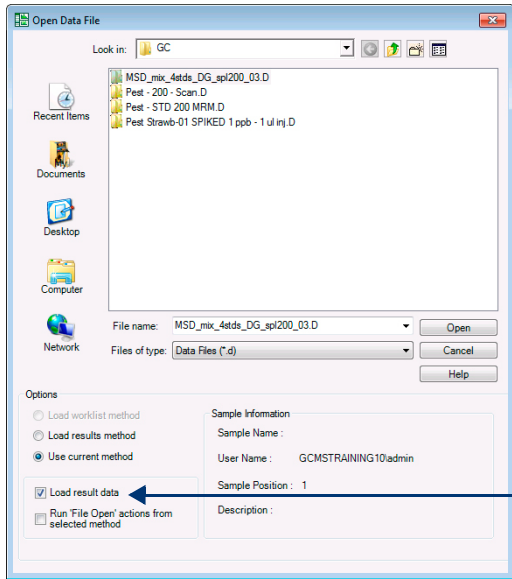
Tâche 17. Enregistrement des résultats

Au cours de cette tâche, vous allez enregistrer les résultats pour le fichier de données en cours.

Tâche 17. Enregistrement des résultats

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Enregistrer les résultats pour le fichier de données en cours et fermer le fichier de données.	a Cliquez sur File > Save Results. b Cliquez sur File > Close Data File.	Vous ne pouvez enregistrer qu'un seul jeu de résultats avec un fichier de données. Si vous avez déjà enregistré des résultats pour le fichier de données en cours, ils sont écrasés lorsque vous cliquez sur File > Save Results.
2 Ouvrir le fichier de données et charger les résultats.	a Cliquez sur File > Open Data File. La boîte de dialogue Open Data File s'ouvre. b Sélectionnez un fichier de données. Pour cet exemple, sélectionnez le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. c Cochez la case Load result data. d Cliquez sur le bouton Open.	

Tâche 17. Enregistrement des résultats

Étape	Instructions détaillées	Remarques
		La case Load result data est cochée.
3	Examiner les résultats. a Sélectionnez la fenêtre Spectrum Identification Results. b Réviser les résultats.	

2 Détection et identification

Tâche 17. Enregistrement des résultats

Tâche 17. Enregistrement des résultats

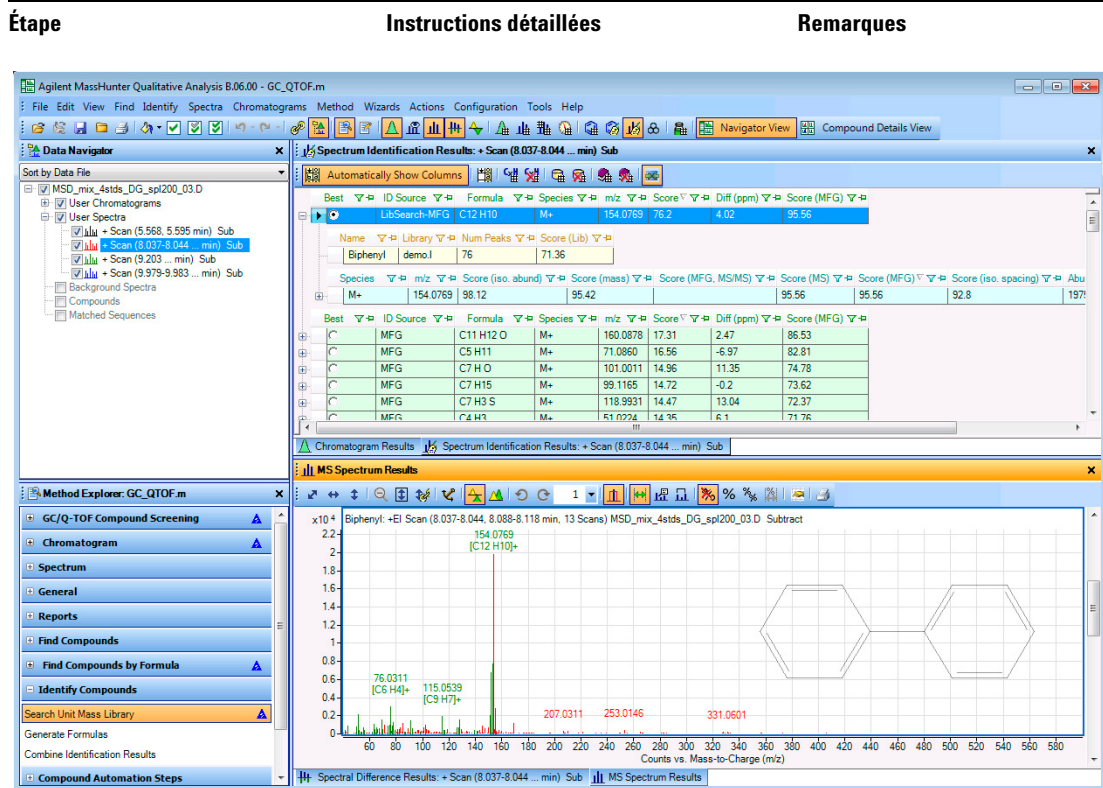


Figure 44 Résultats de la recherche en bibliothèque et de la génération de formules pour le premier spectre de pic

- 4 Fermer le fichier de données.
 - a Cliquez sur **File > Close Data File**.
 - b Cliquez sur **Close**.
- 5 Ouvrir à nouveau le fichier de données et ne pas charger les résultats.
 - a Cliquez sur **File > Open**. La boîte de dialogue Open Data File s'ouvre.
 - b Sélectionnez un fichier de données. Pour cet exemple, sélectionnez le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.
 - c Désélectionnez la case **Load result data**.
 - d Cliquez sur le bouton **Open**.
 - Si vous ne chargez pas de résultats, un CIT par défaut s'ouvre lorsque vous ouvrez un fichier de données. Si vous sélectionnez les actions Run 'File Open' dans la boîte de la méthode sélectionnée, les actions File Open sont exécutées à la place. Pour plus d'informations, consultez l'aide en ligne.

Tâche 17. Enregistrement des résultats

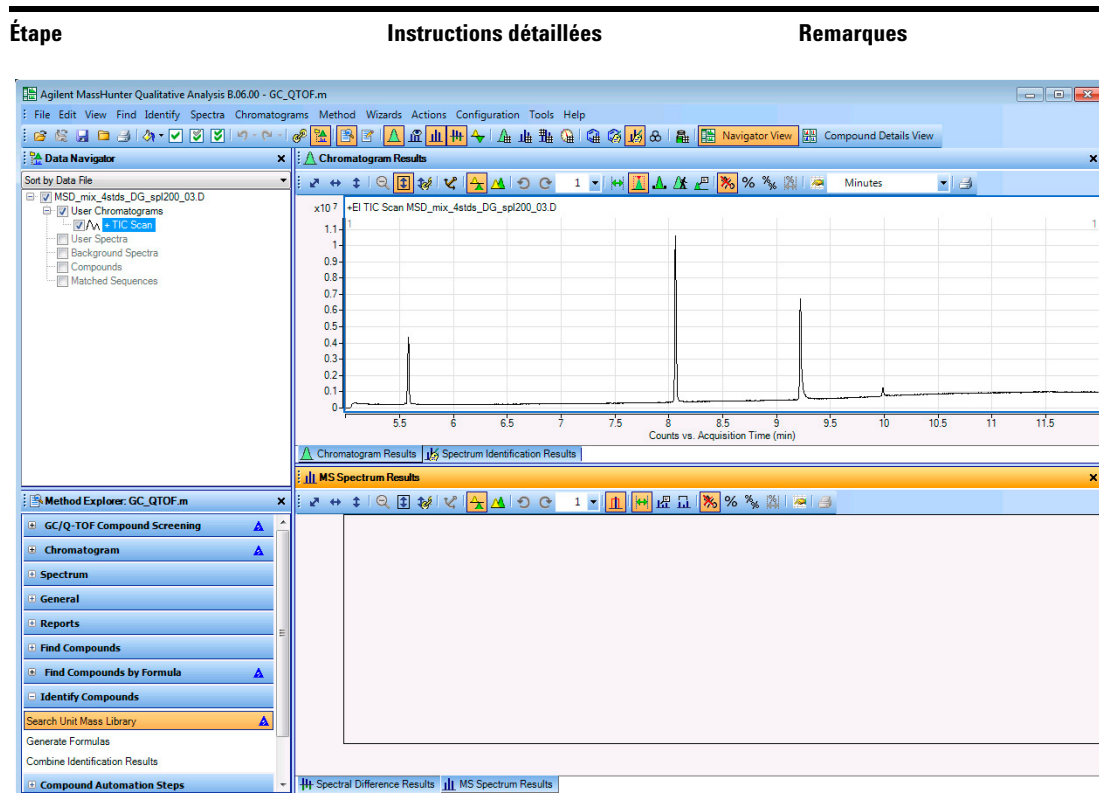
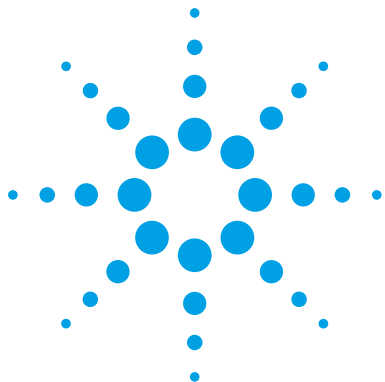


Figure 45 Résultats de la recherche en bibliothèque et de la génération de formules pour le premier spectre de pic

- 6** Fermer le fichier de données.
- a** Cliquez sur **File > Close Data File**.
 - b** Cliquez sur **Close**.

2 Détection et identification

Tâche 17. Enregistrement des résultats



3

Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

- Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général 78
- Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening 83
- Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF 87
- Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse 89
- Tâche 22. Impression d'un rapport de composé 92

Au cours de ces tâches, vous allez apprendre comment configurer et exécuter une méthode d'analyse qualitative. Ensuite, vous allez exécuter les actions de la méthode automatisée en ouvrant un fichier de données.

Deux flux de travaux différents sont utilisés pour ces exemples. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section « **Flux de travaux** », page 105.

Le flux de travaux général (General) prend en charge les données CPG/QQQ, CPG/Q-TOF et CPL/SM. Le flux de travaux de criblage des composés CPG/Q-TOF (GC/Q-TOF Compound Screening) prend en charge des données CPG/Q-TOF.

Chaque exercice est présenté dans un tableau à trois colonnes:

- Étapes: utilisez ces instructions générales afin d'explorer le programme par vous-même.
- Instructions détaillées: utilisez-les si vous avez besoin d'aide ou si vous préférez suivre une méthode d'apprentissage pas à pas.
- Remarques: lisez-les pour obtenir des astuces et des informations supplémentaires sur chaque étape de l'exercice.



Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Lorsque vous commencez à utiliser le programme Analyse qualitative pour la première fois, la méthode default.m est chargée. Vous pouvez apporter des modifications à la méthode ouverte et la sauvegarder, ou ouvrir une nouvelle méthode, faire des changements et enregistrer la méthode. Vous ne pouvez pas écraser la méthode default.m.

Vous pouvez également configurer l'exécution d'actions spécifiques dans la méthode lorsque vous ouvrez un fichier de données. Lorsque vous ouvrez un fichier de données, vous pouvez également charger la méthode qui a été utilisée pour créer les résultats stockés avec le fichier. La méthode est enregistrée automatiquement chaque fois que vous sauvegardez les résultats avec le fichier de données. Le flux de travaux général peut être utilisé avec des fichiers de données CPG/SM ou CPL/SM.

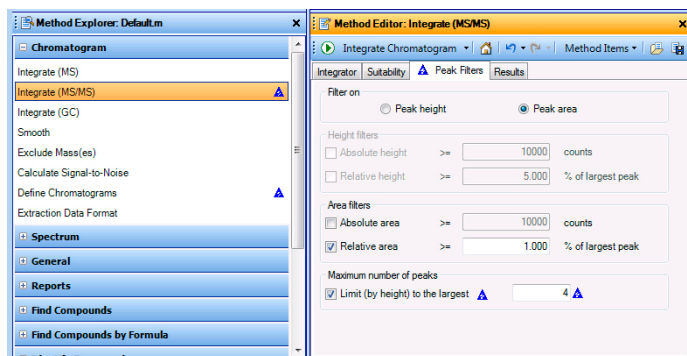
Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d .	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données Pest - STD 200 MRM.d dans le dossier du fichier d'exemples de données GC. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	Utilisez ce même flux de travaux ou celui de criblage des composés CPG/Q-TOF pour travailler avec des données CPG/SM.
2 Configurer l'interface utilisateur pour travailler avec des données CPG.	Suivez les instructions de la « Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM », page 13.	Pour cet exemple, sélectionnez le flux de travaux général.
3 Configurer la méthode pour extraire un chromatogramme CIT. Définir un chromatogramme CIT pour des données SM.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Chromatogram > Define Chromatograms. b Supprimez le chromatogramme BPC. c Sélectionnez TIC comme Type. d Assurez-vous que la valeur de MS Level est MS/MS. e Cliquez sur Add.	

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4 Éditer la méthode pour intégrer les données. • Limiter l'intégration aux quatre pics les plus élevés.	a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Chromatogram > Integrate (MS/MS) . b Cliquez sur l'onglet Peak Filters . c Dans la section Maximum number of peaks, cochez la case Limit (by height) to the largest . d Tapez 4.	• La mise à jour d'une valeur dans l'onglet Peak Filters de la section Chromatogram > Integrate (MS) actualise également les valeurs des autres sections de la fenêtre Method Explorer. Des triangles bleus apparaissent pour montrer ces autres sections.



Vous pouvez cliquer sur l'icône Save Method pour enregistrer la méthode en cours.

Figure 46 Chromatogram > Integrate (MS/MS) > onglet Peak Filters

5 Tester l'intégration pour s'assurer que seuls 4pics intégrés apparaissent.	• Cliquez sur l'icône Integrate Chromatogram  pour intégrer le fichier de données.	
6 Enregistrer la méthode dans <i>iii_GCexercice1</i> , où <i>iii</i> correspond à vos initiales.	a Dans le menu principal, cliquez sur Method > Save As . b Tapez <i>iii_GCexercice1</i> . c Cliquez sur le bouton Save .	• Notez que l'enregistrement de la méthode entraîne la disparition de tous les triangles bleus indiquant des changements de valeur dans la méthode ouverte.
7 Changer le fond du spectre de pic afin d'utiliser le spectre au début d'un pic.	a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Spectrum > Extract (MS/MS) . b Cliquez sur Peak Spectrum Extraction (MS/MS) . c Pour Peak spectrum background, sélectionnez l'option Spectrum at peak start .	• Si vous effectuez des modifications supplémentaires après l'enregistrement de la méthode, des triangles bleus sont ajoutés.

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

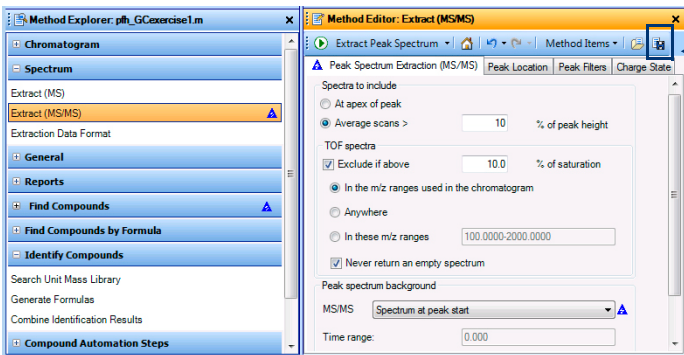
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		Vous pouvez cliquer sur l'icône Save Method pour enregistrer la méthode en cours.

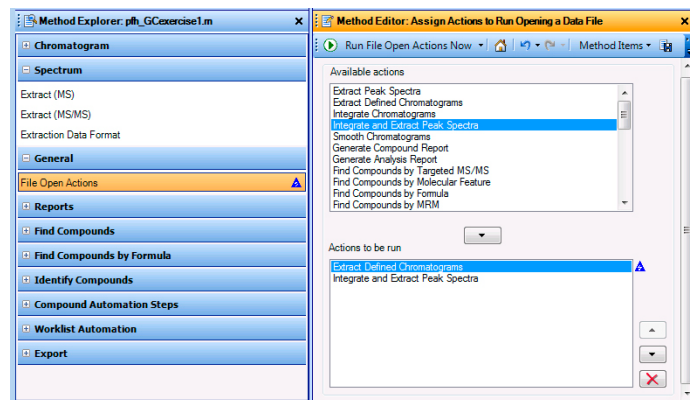
Figure 47 Spectrum > Extract (MS/MS) > onglet Peak Spectrum Extraction (MS/MS)

- 8 Tester l'extraction de spectre SM pour s'assurer qu'un spectre de fond est soustrait.
 - Cliquez sur l'icône **Extract Peak Spectrum**  pour exécuter l'action sur le pic sélectionné dans le fichier de données.
- 9 Enregistrer la méthode.
 - Enregistrez la méthode à l'aide de l'une des trois méthodes suivantes:
 - Cliquez sur l'icône **Save Method** dans Method Editor . 
 - Cliquez avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre Method Editor, puis sélectionnez **Save Method**.
 - Dans le menu principal, cliquez sur **Method > Save**.
 - L'icône Save Method est illustrée dans la Figure 47, page 80.

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
10 Configurer la méthode pour automatiser les actions dont vous venez juste de modifier les paramètres lorsque vous ouvrez un fichier de données. Énumérer les actions à effectuer lorsque ce fichier de données ou un autre est ouvert.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez General > File Open Actions. b Sélectionnez Integrate and Extract Peak Spectra dans la liste Available actions. c Cliquez sur le bouton Add pour déplacer l'action sélectionnée dans la liste Actions to be run. Vous pouvez également double-cliquer sur l'action sélectionnée pour la déplacer dans l'autre liste.	
11 Tester File Open Actions.	Cliquez sur l'icône Run File Open Actions Now pour exécuter les actions sur le fichier de données.	Les chromatogrammes et les spectres ne sont pas écrasés. De nouveaux chromatogrammes et spectres sont ajoutés.



Deux actions différentes font partie de la liste Actions to be run. La première action consiste à extraire les chromatogrammes définis. Ensuite, le chromatogramme est intégré et les pics sont extraits.

Figure 48 Section General > File Open Actions dans Method Editor

12 Enregistrer la méthode.	Cliquez sur l'icône Save Method dans la fenêtre Method Editor.
-----------------------------------	---

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

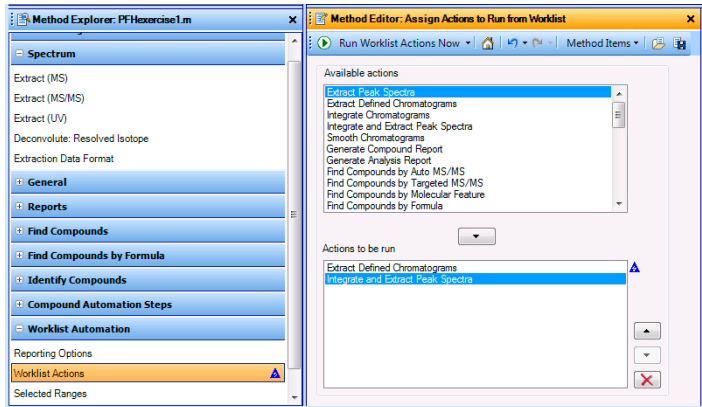
Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Tâche 18. Configuration et exécution d'une méthode d'analyse qualitative à l'aide du flux de travaux général

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
13 Configurer la méthode pour automatiser les actions lorsque la méthode est exécutée au cours d'une liste de tâches. Énumérer les actions à effectuer lorsque ce fichier de données ou un autre est ouvert.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Worklist Automation > Worklist Actions. b Supprimez Generate Analysis Report de la liste Actions to be run.	

Astuce: rechercher sous Worklist Automation dans la fenêtre Method Explorer.

14 Tester Worklist Actions.	Cliquez sur l'icône Run Worklist Actions Now pour exécuter les actions sur le fichier de données.	Les chromatogrammes et les spectres ne sont pas écrasés. De nouveaux chromatogrammes et spectres sont ajoutés.
------------------------------------	--	--



Deux listes d'actions différentes sont incluses dans une méthode. La première liste d'actions (File Open Actions) peut être exécutée lorsqu'un fichier de données est ouvert. La deuxième liste d'actions (Worklist Actions) est exécutée lors de l'exécution de la méthode.

Figure 49 Worklist Automation > section Worklist Actions dans la fenêtre Method Editor

15 Enregistrer la méthode et fermer le fichier de données sans sauvegarder les résultats.	a Cliquez sur l'icône Save Method dans la fenêtre Method Editor. b Cliquez sur File > Close Data File, puis sur No lorsque le système vous invite à enregistrer les résultats.
--	--

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Au cours de cette tâche, vous allez configurer une méthode d'analyse qualitative qui contient une liste d'actions d'analyse à exécuter dans un ordre spécifique. Elles incluent l'extraction et l'intégration de chromatogrammes, l'extraction de spectre, la recherche en bibliothèque de spectres de pic, la génération de formules pour des spectres et l'impression d'un rapport d'analyse.

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le CIT pour le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data et cliquez sur Open.	
2 Configurer l'interface utilisateur pour travailler avec des données CPG.	• Suivez les instructions de la « Tâche 2. Configuration de l'interface utilisateur pour des données CPG/SM », page 13.	• Pour cet exemple, sélectionnez le flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening.
3 S'assurer qu'un CIT est extrait.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez Chromatogram. b Cliquez dans la section Define Chromatograms. c Dans la fenêtre Method Editor, vérifiez que le chromatogramme de la section Defined chromatograms est un CIT. Si ce n'est pas le cas, sélectionnez TIC comme Type. Cliquez sur le bouton Change.	•

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
4 Réviser les paramètres de l'algorithme Find by Chromatogram Deconvolution.	- a Cliquez sur GC/Q-TOF Compound Screening > Find by Chromatogram Deconvolution dans la fenêtre Method Explorer. - b Cliquez sur l'onglet Mass Filter. - c Définissez la valeur de Absolute height à 13000. - d Cliquez sur l'onglet Results. - e Cliquez sur le bouton Highlight all compounds. - f Réviser les résultats dans chaque onglet.	• Examinez les sections du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening. • Notez les six sections du flux de travaux. Toutes ces sections sont des doubles de sections faisant déjà partie de l'explorateur de méthode. • Notez que des triangles bleus apparaissent dans d'autres sections de la fenêtre Method Explorer. Ils indiquent que les mêmes valeurs de paramètre ont été modifiées ailleurs également.
5 Réviser les paramètres de l'algorithme Identify by Library Search.	- a Cliquez sur GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search dans la fenêtre Method Explorer. - b Cliquez sur le bouton Add Library. Sélectionnez une bibliothèque et cliquez sur Open. - c (facultatif) Cliquez sur le bouton Remove Library pour supprimer une bibliothèque si vous ne souhaitez pas l'utiliser. - d Réviser les paramètres dans chaque onglet.	• La bibliothèque demo.I ou NIST08.I (ou une autre version de la bibliothèque NIST) est installée dans le dossier \MassHunter\Library.
6 Enregistrer la méthode dans <i>iii</i> _GCexercice2, où <i>iii</i> correspond à vos initiales.	- a Dans le menu principal, cliquez sur Method > Save As. - b Tapez <i>iii</i>_GCexercice2. - c Cliquez sur le bouton Save.	

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
7 Configurer la méthode pour automatiser les actions lorsqu'un fichier de données est ouvert. Énumérer les actions à effectuer lorsque ce fichier de données ou un autre est ouvert. Astuce: rechercher sous General dans la fenêtre Method Explorer.	a Dans la fenêtre Method Explorer, sélectionnez General > File Open Actions. b Supprimez Generate Analysis Report de la liste Actions to be run. c Supprimez Integrate and Extract Peak Spectra. d Supprimez toutes les autres actions de la liste. e Ajoutez Extract Defined Chromatograms. f Ajoutez Find Compounds by Chromatographic Deconvolution. g Ajoutez Search Spectral Library for Compound.	
8 Tester File Open Actions.	Cliquez sur l'icône Run 'File Open' Actions Now  pour exécuter les actions sur le fichier de données.	Les chromatogrammes et les spectres ne sont pas écrasés. De nouveaux chromatogrammes et spectres sont ajoutés.

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening

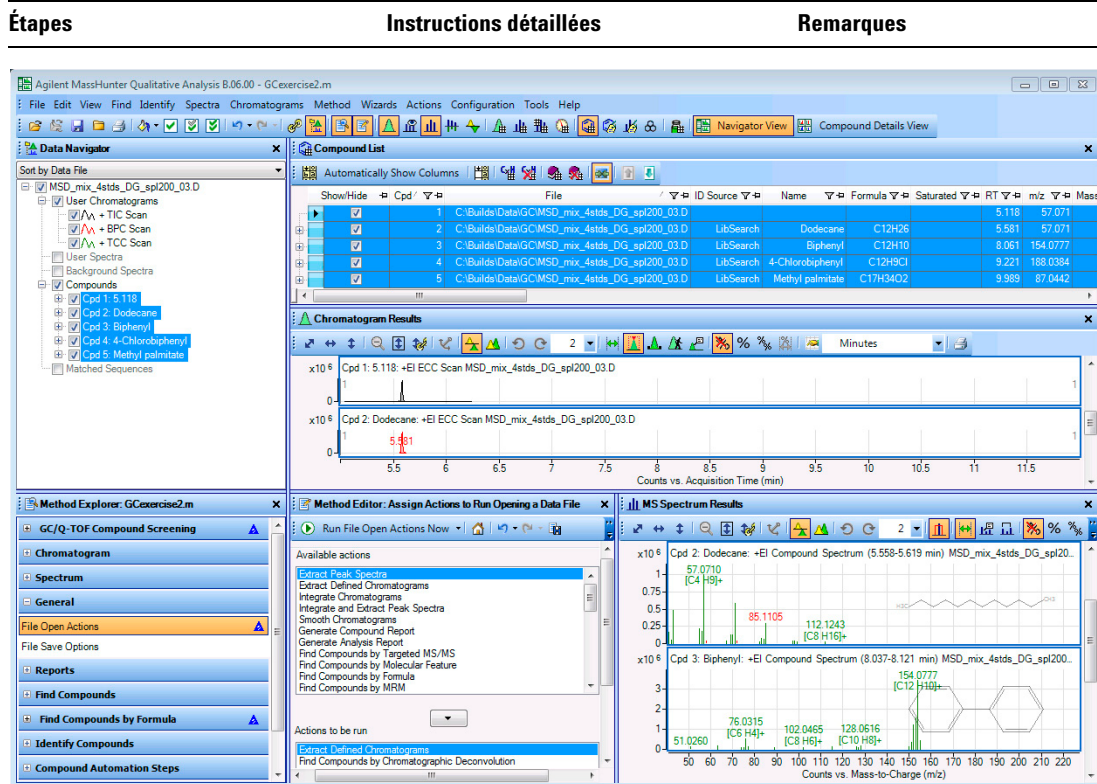


Figure 50 Résultats de l'exécution des actions de la liste de tâches sur les données CPG/Q-TOF

- 9** Enregistrer la méthode dans *iii*_GCExercise2, où *iii* correspond à vos initiales.

 - a** Dans le menu, cliquez sur **Method > Save As**.
 - b** Tapez *iii*_GCExercise2.
 - c** Cliquez sur **Save**.
 - Si la méthode est exécutée pendant une liste de tâches d'acquisition de données, les actions de la liste de tâches de cet onglet sont exécutées dans l'ordre indiqué.
- 10** Fermer le fichier de données sans enregistrer les résultats.

 - a** Cliquez sur **File > Close Data File**.
 - b** Cliquez sur **No** lorsque le système vous invite à enregistrer les résultats.

Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF

Vous pouvez exporter un fichier CEF contenant des informations sur les composés. Ce fichier CEF peut être importé dans d'autres programmes, tels que MassHunter Quantitative Analysis et Mass Profiler Professional. Vous pouvez également importer des composés qui ont été exportés dans un fichier CEF.

Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Ouvrir le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d et exécuter les actions File Open pour la méthode <i>iii_GCexercice2.m</i> créée au cours de la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83.	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data. d Cochez la case Run 'File Open' actions from selected method. e Cliquez sur le bouton Use current method et cliquez sur Open.	Si vous avez terminé la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83, la méthode actuelle est <i>iii_GCexercice2.m</i>. Cette méthode est configurée pour exécuter l'algorithme Find Compounds by Chromatogram Deconvolution, puis l'algorithme Search Library sur chaque composé.
2 Exporter un fichier CEF.	a Pour exporter de manière interactive le fichier, cliquez sur File > Export > as CEF. b Cliquez sur le bouton All results. c Sélectionnez l'emplacement du fichier d'exportation. d Cliquez sur OK.	Un fichier CEF est utilisé pour exporter des composés.

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF

Tâche 20. Exportation d'un fichier CEF (suite)

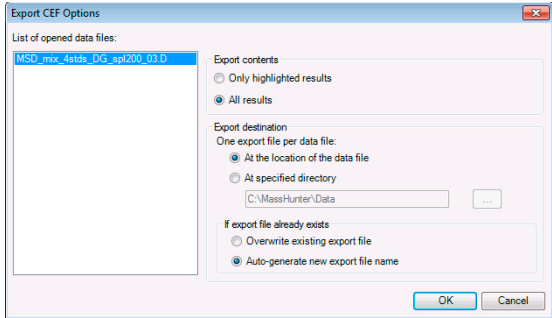
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		

Figure 51 Boîte de dialogue Export CEF Options

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse

Chaque fois que vous voulez imprimer un rapport d'analyse après l'exécution de l'une des tâches de cet exercice ou du suivant, utilisez ces instructions.

Un rapport d'analyse peut contenir les résultats de l'extraction et de l'intégration de chromatogrammes, de l'extraction de spectres, de la détection de composés, des recherches de spectres de pic dans la base de données ou de la génération de formules à partir de spectres de pic.

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse

Étapes	Instructions détaillées	Remarques
1 Si le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d n'est pas déjà chargé, l'ouvrir et exécuter les actions File Open pour la méthode <i>iii_GCexercice2.m</i> créée au cours de la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83.	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data. d Cochez la case Run 'File Open' actions from selected method. e Cliquez sur le bouton Use current method et cliquez sur Open.	Si vous avez terminé la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83, la méthode actuelle est <i>iii_GCexercice2.m</i>. Cette méthode est configurée pour exécuter l'algorithme Find Compounds by Chromatogram Deconvolution, puis l'algorithme Search Library sur chaque composé.
2 Changer les sélections du rapport d'analyse dans la méthode: - Cocher les cases des chromatogrammes, spectres ou tableaux à imprimer. - Désélectionner les cases des chromatogrammes, spectres ou tableaux à ne pas imprimer.	a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Reports > Analysis Report. b Cochez les cases des sélections supplémentaires à imprimer. c Désélectionnez les cases des chromatogrammes et spectres que vous ne souhaitez pas imprimer.	- Le rapport d'analyse contient uniquement les informations que vous avez sélectionnées dans cette section. - Si certains résultats ne sont pas disponibles, ils ne sont pas inclus, même s'ils sont sélectionnés dans cette section. Par exemple, si vous n'avez pas intégré le chromatogramme, le tableau des pics n'est pas inclus.

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse (suite)

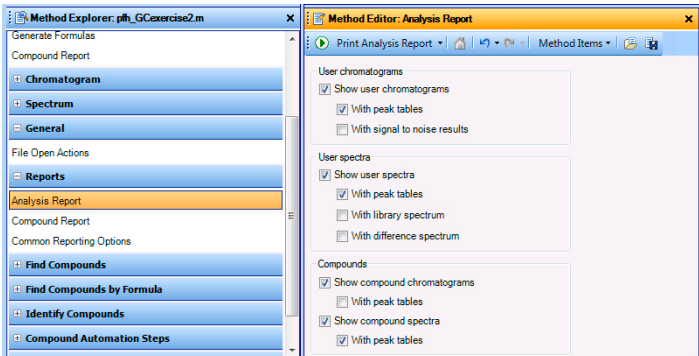
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		Par défaut, la fenêtre Method Editor est flottante. Elle est visible comme une fenêtre distincte du reste du programme d'analyse qualitative. Pour ancrer la fenêtre, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le titre de la fenêtre, puis cliquez sur Floating. Vous pouvez également cliquer sur la barre de titre pour ancrer la fenêtre.

Figure 52 Section Analysis Report dans les fenêtres Method Explorer et Method Editor

3 Imprimer le rapport.

- Vous pouvez imprimer le rapport de manière interactive de plusieurs façons:
 - Dans le menu principal, cliquez sur **File > Print > Analysis Report**.
 - Dans la barre d'outils principale, cliquez sur l'icône Printer.
 - Cliquez sur l'icône **Print Analysis Report** dans la barre d'outils Method Editor lorsque la section Analysis Report est sélectionnée.
 - Cliquez avec le bouton droit de la section Analysis Report dans Method Editor, puis cliquez sur **Print Analysis Report**.
 - Dans le menu contextuel du fichier de données dans Data Navigator, cliquez sur **Analysis Report**.
 - Cliquez sur **Report contents**.
 - Cochez la case **Print report** et sélectionnez une imprimante.
 - Cochez la case **Print preview**.
 - Cliquez sur le bouton **OK**.
- L'icône Run de la barre d'outils Method Editor vous permet parfois de choisir une action parmi plusieurs actions possibles. Par exemple, si vous basculez sur la section Reports > Common Reporting Options de la fenêtre Method Editor, quatre actions différentes sont possibles lorsque vous cliquez sur l'icône Run. Si vous cliquez sur la flèche, une liste d'actions possibles s'affiche et vous pouvez choisir l'action à exécuter. Le fait de choisir une autre action dans la liste change l'action par défaut. Si vous cliquez simplement sur le bouton Run, l'action courante par défaut est effectuée.

Tâche 21. Impression d'un rapport d'analyse (suite)

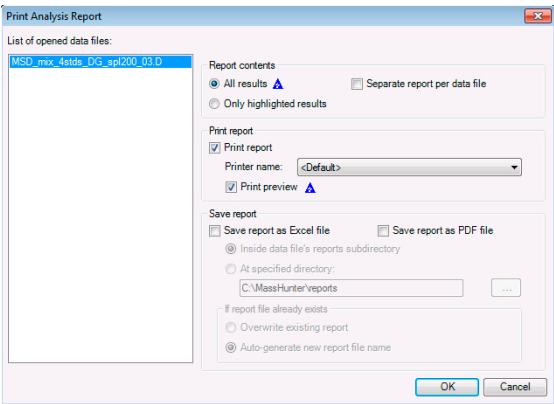
Étapes	Instructions détaillées	Remarques
		

Figure 53 Boîte de dialogue Print Analysis Report

- f Révisez le rapport.
- g Cliquez sur l'icône **Close Print Preview** dans la barre d'outils.

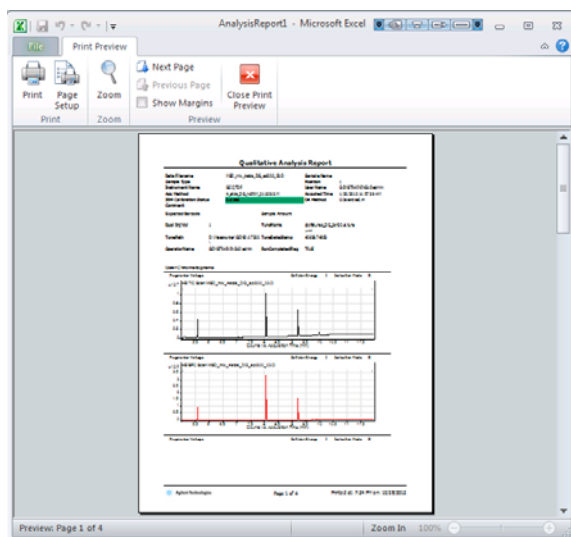


Figure 54 Fenêtre Print Preview avec rapport d'analyse

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé

Chaque fois que vous voulez imprimer un rapport de composé, suivez ces instructions.

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé

Étape	Instructions détaillées	Remarques
1 Si le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d n'est pas déjà chargé, l'ouvrir et exécuter les actions File Open pour la méthode <i>iii_GCexercice2.m</i> créée au cours de la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83.	a Si le programme n'est pas déjà ouvert, double-cliquez sur l'icône MassHunter Qualitative Analysis. Sinon, cliquez sur File > Open Data File. b Cliquez sur le fichier de données MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d dans le dossier de fichiers d'exemples de données CPG. c Désélectionnez la case Load result data. d Cochez la case Run 'File Open' actions from selected method. e Cliquez sur le bouton Use current method et cliquez sur Open.	• Si vous avez terminé la « Tâche 19. Configuration et exécution d'une méthode à l'aide du flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening », page 83, la méthode actuelle est <i>iii_GCexercice2.m</i>. Cette méthode est configurée pour exécuter l'algorithme Find Compounds by Chromatogram Deconvolution, puis l'algorithme Search Library sur chaque composé.
2 Changer des sélections dans la méthode des rapports de composé: • Désactiver l'affichage des spectres SM dans lesquels des pics spéciaux sont zoomés. • Désactiver les options SM/SM dans le rapport.	a Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur Reports > Compound Report. b Désélectionnez la case Show MS spectrum. c Désélectionnez la case Show MS/MS spectrum. d Désélectionnez la case Show MS/MS peak table.	• Ces cases à cocher permettent de spécifier les informations à inclure dans un rapport si elles sont disponibles. En revanche, si elles ne le sont pas, la section est automatiquement ignorée. Par exemple, les résultats SM/SM ne sont jamais inclus si le fichier de données est uniquement SM.

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé

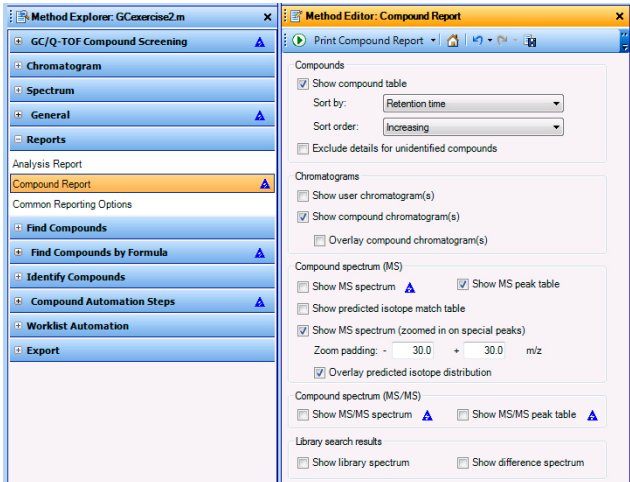
Étape	Instructions détaillées	Remarques
		La case Overlay compound chromatograms doit être désélectionnée pour les données CPG/Q-TOF.

Figure 55 Section Compound Report de la fenêtre Method Editor

3 (facultatif) Choisir un autre modèle de rapport de composé.

- Dans la fenêtre Method Explorer, cliquez sur **Reports > Common Reporting Options**.
- Sélectionnez le fichier **CompoundReport WithIdentificationHits.xlsx** comme modèle de rapport de composé.

- Plusieurs modèles de rapport différents sont inclus dans le logiciel.
- Vous pouvez personnaliser un modèle de rapport à l'aide d'Excel et de l'extension Report Designer.

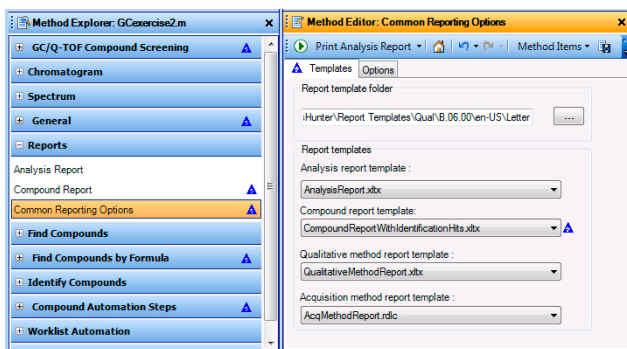


Figure 56 Section Common Reporting Options de la fenêtre Method Editor

Vous pouvez utiliser Excel et l'extension Report Designer pour personnaliser l'un des modèles ayant l'extension XLTX. Vous ne pouvez pas personnaliser le rapport de la méthode d'acquisition.

3 Utilisation des flux de travaux, exportation et impression

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé

Tâche 22. Impression d'un rapport de composé

Étape	Instructions détaillées	Remarques
4 Imprimer le rapport.	a Cliquez sur File > Print > Compound Report ou cliquez sur la flèche de l'icône Print Analysis Report et cliquez sur Print Compound Report pour imprimer le rapport de composé. b Cochez la case Print preview. c Cliquez sur OK. Examinez le rapport. d Cliquez sur l'icône Close Print Preview.	• Dans la boîte de dialogue Print Compound Report, vous pouvez sélectionner une autre imprimante, choisir d'enregistrer un fichier PDF ou Excel, d'imprimer tous les résultats ou seulement les résultats sélectionnés, et de combiner ou non différents fichiers de données dans un rapport. • Pour plus d'informations, consultez l'aide en ligne ou le DVD Report Designer Training.

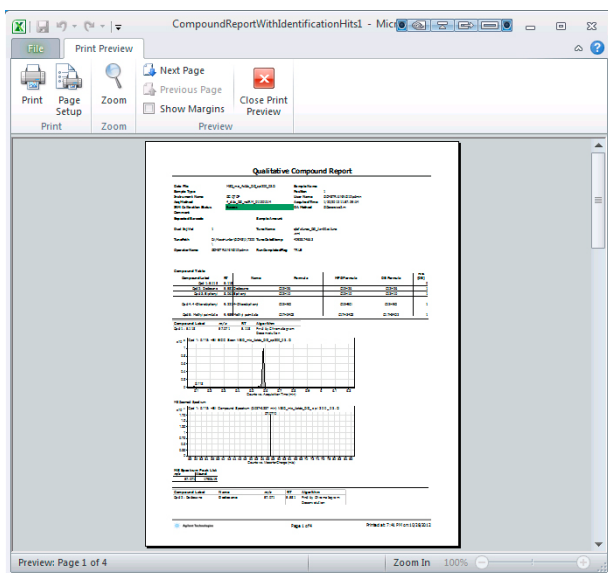
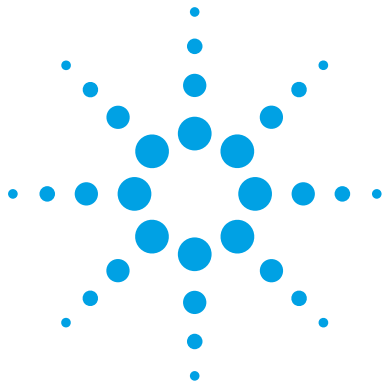


Figure 57 Fenêtre Print Preview avec rapport de composé

- | | |
|---|--|
| <p>5 Fermer le fichier de données sans enregistrer les résultats.</p> | <p>a Cliquez sur File > Close Data File.</p> <p>b Cliquez sur No lorsque le système vous demande si vous souhaitez enregistrer les résultats.</p> |
|---|--|



Référence

Utilisation des fenêtres	96
Utilisation des données de résultats dans Data Navigator	99
Exécution d'opérations sur le chromatogramme	100
Exécution d'opérations sur un spectre SM ou SM/SM	101
Utilisation de données chromatographiques visuelles	102
Utilisation de données spectrales visuelles	104
Flux de travaux	105
Personnalisation d'un modèle de rapport	109



Utilisation des fenêtres

Lorsque vous ouvrez pour la première fois le programme Analyse qualitative, vous pouvez voir quatre fenêtres dans la présentation par défaut: Data Navigator, Method Explorer, Chromatogram Results et MS Spectrum Results. Vous pouvez basculer entre les fenêtres Navigator View et Compound Details View.

Vous pouvez afficher 17 autres fenêtres dans Navigator View à l'aide du menu View:

- Method Editor permet d'éditer les paramètres de méthode séparés dans différents onglets
- Spectrum Preview permet de balayer rapidement les spectres dans un fichier de données
- MS Spectrum Results affiche les spectres SM et SM/SM
- Difference Results présente les différents résultats après une recherche en bibliothèque
- Deconvolution Results présente les spectres déconvolués
- Deconvolution Mirror Plot présente deux spectres déconvolués dans une image en miroir
- UV Spectrum Results présente les spectres UV, disponibles uniquement pour les données CPL/SM
- Integration Peak List affiche les résultats d'intégration dans un tableau
- MS Spectrum Peak List 1 présente le tableau des pics pour le premier spectre sélectionné
- MS Spectrum Peak List 2 présente le tableau des pics pour le deuxième spectre sélectionné
- MS Actuals affiche les informations d'acquisition pour le spectre mis en surbrillance
- Compound List présente les composés détectés à l'aide de l'un des algorithmes Find Compounds
- Compound Identification Results présente les informations d'identification du composé sélectionné
- Spectrum Identification Results présente les informations d'identification du spectre sélectionné
- MS/MS Formula Details affiche un tableau contenant les formules possibles calculées pour les fragments vus dans un spectre SM/SM

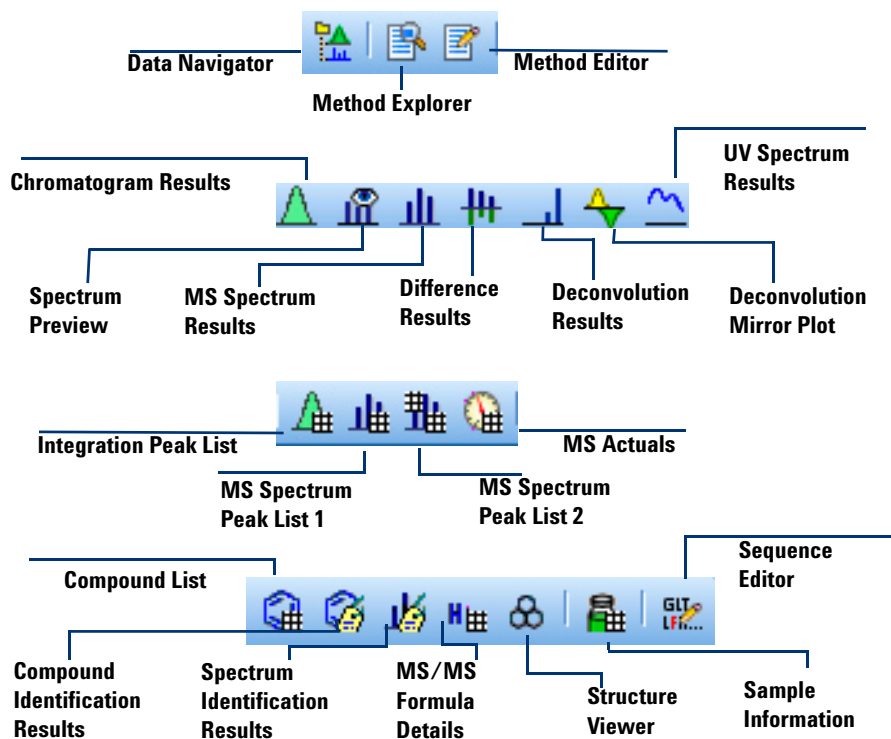
- Structure Viewer présente la structure associée au composé ou aux spectres courants
- Sample Information présente des informations sur le fichier de données mis en surbrillance
- Sequence Editor permet d'éditer une séquence de méthode

Vous pouvez également afficher trois fenêtres d'outils qui s'ouvrent lorsque vous commencez à utiliser l'outil associé:

- Formula Calculator
- Mass Calculator
- Recalibrate

Icônes des fenêtres dans la barre d'outils principale

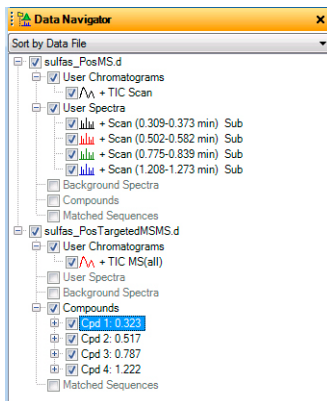
Les icônes de la barre d'outils principale permettent d'ouvrir et de fermer les fenêtres. Des icônes supplémentaires sont disponibles lorsque le logiciel MassHunter BioConfirm est installé. Les options du menu View peuvent être également utilisées pour ouvrir ces fenêtres.



Utilisation des données de résultats dans Data Navigator

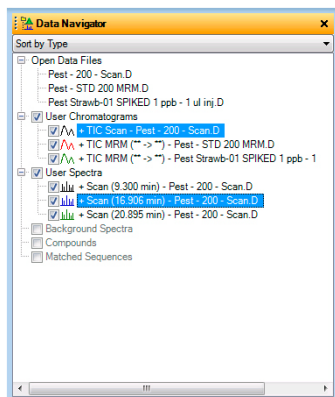
Fenêtre et outils du navigateur de données (Data Navigator)

Data Navigator organise tous les résultats d'extraction et de sélection de spectre par fichier de données ou par type de données.



Icône Linked Navigation

Lorsqu'elle est activée (par défaut), la sélection d'un chromatogramme dans Data Navigator met également en surbrillance les spectres correspondants. Les résultats graphiques du chromatogramme et du spectre correspondants sont également mis en surbrillance. Linked Navigation ne fonctionne que si vous avez utilisé l'option Integrate and Extract Peak Spectra du menu Chromatograms ou si vous avez exécuté l'un des algorithmes Compounds.



Outils permettant de cocher

Coche simple coche les cases de toutes les données en surbrillance.

Coche double, dont une grise coche les cases de toutes les données en surbrillance et supprime les coches des autres cases.

Coche double coche toutes les cases.

Les chromatogrammes et les spectres s'affichent lorsque leurs case sont cochées.

Exécution d'opérations sur le chromatogramme

Vous pouvez exécuter les opérations suivantes sur la totalité ou sur une zone sélectionnée du chromatogramme à l'aide des options de menu suivantes:

Action	Option de menu
Changer les libellés des pics dans le chromatogramme	Configuration > Chromatogram Display Options
Extraire un chromatogramme	Chromatograms > Extract Chromatograms
Extraire les chromatogrammes définis	Chromatograms > Extract Defined Chromatograms
Intégrer le chromatogramme	Chromatograms > Integrate Chromatogram
Intégrer et extraire des spectres de pic	Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra
Intégrer et déconvoluer des spectres de pic	Chromatograms > Integrate and Deconvolute Peak Spectra
Lisser le chromatogramme	Chromatograms > Smooth Chromatogram
Soustraire un chromatogramme	Chromatograms > Subtract Any Chromatogram
Calculer le rapport signal/bruit	Chromatograms > Calculate Signal-to-Noise
Détecter des composés à partir de données auto SM/SM	Find > Find Compounds by Auto MS/MS
Détecter des composés à partir de données ciblées SM/SM	Find > Find Compounds by Targeted MS/MS
Détecter des composés à partir de données SM(1)	Find > Find Compounds by Molecular Feature
Détecter des composés à partir de données CPG/SM	Find > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution
Détecter des composés pour des données MRM	Find > Find Compounds by MRM
Détecter des composés par les résultats d'intégration	Find > Find Compounds by Integration
Détecter des composés qui correspondent à des formules spécifiques	Find > Find Compounds by Formula

Sélectionner des opérations de la gamme à partir d'un menu contextuel

Si vous avez sélectionné une gamme chromatographique, vous pouvez également extraire un spectre de fond, en plus des opérations mentionnées ci-dessus et des autres qui ne le sont pas.

- 1 Pour accéder à ces opérations, cliquez sur l'outil Range Select  dans la barre d'outils Chromatogram Results.
- 2 Cliquez sur le point auquel vous souhaitez démarrer la gamme, faites glisser le pointeur sur une plage et relâchez le bouton de la souris.
- 3 Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le chromatogramme et sélectionnez l'opération dans le menu contextuel qui s'affiche.

Enregistrer les résultats dans le(s) fichier(s) de données

- Cliquez sur l'icône **Save**  ou sélectionnez **File > Save Results**.

Lorsque vous quittez le programme, il vous demande également si vous voulez enregistrer les résultats dans le fichier de données, à moins que vous n'ayez désactivé cette option dans la boîte de dialogue Message Box Options.

Exécution d'opérations sur un spectre SM ou SM/SM

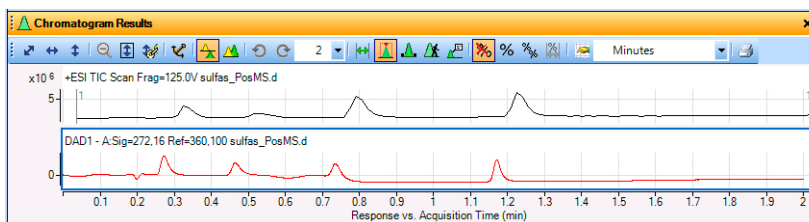
Vous pouvez effectuer les opérations suivantes sur un spectre SM ou SM/SM ou sur une zone sélectionnée d'un spectre SM ou SM/SM à l'aide des options de menu suivantes:

Action	Option de menu
Afficher le rapport m/z, l'abondance, l'état de charge et d'autres informations sur les pics d'un spectre	View > MS Spectrum Peak List 1
Changer les libellés d'un pic spectral	Configuration > MS and MS/MS Spectra Display Options
Soustraire le spectre de fond	Spectra > Subtract Background Spectrum
Soustraire un spectre	Spectra > Subtract Any Spectrum (puis cliquer sur un autre spectre)
Ajouter deux spectres à la fois	Spectra > Add Any Spectrum (puis cliquer sur un autre spectre)

Action	Option de menu
Rechercher dans une base de données des entrées qui correspondent à des masses spécifiques d'un spectre	Spectra > Search Database for Spectrum Peaks
Générer des formules pour les masses dans la gamme sélectionnée d'un spectre	Spectra > Generate Formulas from Spectrum Peaks (lorsqu'une gamme est sélectionnée dans le spectre SM)
Déconvoluer à l'aide de l'algorithme Resolved Isotope	Spectra > Deconvolute (Resolved Isotope)
Rechercher en bibliothèque	Identify > Search Library for Spectra ou Spectra > Search Library for Spectra

Utilisation de données chromatographiques visuelles

Fenêtre Chromatogram Results



Outils Chromatogram Results

Outils de zoom dans l'ordre



Échelle automatique des axes X et Y

Échelle automatique de l'axe X

Échelle automatique de l'axe Y

Annuler le zoom

Échelle automatique de l'axe Y pendant un zoom

Mode axe Y lié

Outils de sélection dans l'ordre



L'un de ces outils doit
toujours être sélectionné.

Range Select: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez dessiner une plage sur un chromatogramme, dans laquelle vous pouvez effectuer des actions.

Peak Select: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez sélectionner le spectre d'un pic intégré à son sommet.

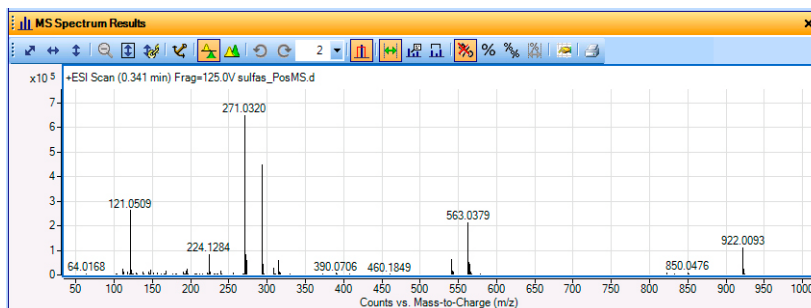
Manual Integration: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez intégrer de manière interactive.

Walk Chromatogram: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez voir des spectres individuels lorsque vous cliquez sur chaque point ou utilisez les flèches droite et gauche sur le clavier.

Annotation: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez ajouter des annotations image et texte aux chromatogrammes.

Utilisation de données spectrales visuelles

Fenêtre MS Spectrum Results



Outils MS Spectrum Results

Outils de zoom dans l'ordre



Échelle automatique des axes X et Y

Échelle automatique de l'axe X

Échelle automatique de l'axe Y

Annuler le zoom

Échelle automatique de l'axe Y pendant un zoom

Mode axe Y lié

Outils de sélection dans l'ordre



Pour annuler la
sélection d'un outil,
cliquez sur un autre
outil ou une autre
icône.

Range Select: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez dessiner une plage sur un chromatogramme, dans laquelle vous pouvez effectuer des actions.

Annotation: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez ajouter des annotations image et texte aux chromatogrammes.

Calipers: lorsque cet outil est **activé**, vous pouvez ajouter un compas d'épaisseur sur le spectre sélectionné. Dans la fenêtre Deconvolution Results, vous pouvez également ajouter un dispositif pour les acides aminés (Amino Acid caliper) ou pour les modifications. Pour plus d'informations, consultez l'aide en ligne.

Flux de travaux

Les flux de travaux permettent de personnaliser l'interface utilisateur pour votre application. Chaque flux de travaux charge une méthode différente dont les paramètres lui sont appropriés. De plus, chaque flux de travaux charge une présentation différente. Les présentations incluent la personnalisation des colonnes affichées dans chacun des tableaux. Enfin, quatre des présentations ajoutent également une section réservée à un éditeur de méthode qui contient des copies des sections de l'éditeur de méthode ayant de l'importance pour le flux de travaux. Le regroupement des fonctions utilisées dans un flux de travaux spécifique facilite la personnalisation de votre méthode.

Le programme d'analyse qualitative comporte les différents flux de travaux suivants:

- General
- BioConfirm - Ces flux de travaux sont disponibles uniquement si le logiciel BioConfirm est installé et coché dans la boîte de dialogue User Interface Configuration. BioConfirm propose plusieurs flux de travaux possibles, selon le type d'analyse à réaliser. BioConfirm est utilisé avec des fichiers de données CPL/SM.
- Chromatogram Peak Survey
- Formula Confirmation and Sample Purity
- MS Target Compound Screening
- GC/Q-TOF Compound Screening

Si vous utilisez des données CPG/SM, vous pouvez sélectionner le flux de travaux General ou le flux de travaux GC/Q-TOF Compound Screening. Si vous utilisez des données CPL/SM, vous pouvez sélectionner l'un des flux de travaux, excepté GC/Q-TOF Compound Screening.

Méthode particulière

Chaque flux de travaux charge une méthode par défaut particulière avec des paramètres qui lui sont appropriés. Par exemple, si vous basculez sur l'un des flux de travaux BioConfirm, le **type de données cibles** pour l'algorithme Find Compounds by Molecular Feature est défini à **Large molecules (proteins, oligos)**. Ce paramètre est adapté au flux de travaux BioConfirm mais pas par défaut pour les autres flux de travaux.

Présentation particulière

En outre, chaque flux de travaux charge une présentation spécifique qui établit les éléments suivants:

- Position et taille de chaque fenêtre
- Fenêtres comportant des onglets
- Fenêtres flottantes
- Désignation de la fenêtre avec onglets figurant sur le dessus
- Fenêtres visibles par défaut
- Indique si la barre d'état est visible

Pour chaque fenêtre de tracé (fenêtres Chromatogram Results, Spectrum Preview, MS Spectrum Results, Deconvolution et UV Results), les éléments suivants sont enregistrés:

- Si les graphiques se chevauchent ou non
- Si l'option Autoscale Y-Axis est activée ou non pendant le mode Zoom
- Si le mode Linked Y-Axis est activé ou non

Pour chaque fenêtre représentant un tableau, les éléments suivants sont enregistrés:

- Quelles colonnes sont visibles
- L'ordre des colonnes
- La largeur de chaque colonne
- Tout filtre ayant été ajouté au tableau (disponible uniquement pour le tableau Compound List ou Compound Identification Results et la fenêtre Spectrum Identification Results).

Section spécifique aux fenêtres Method Explorer et Method Editor

Si vous utilisez Method Editor avec le flux de travaux General, vous pouvez modifier presque tous les paramètres de la méthode.

Chaque des quatre autres flux de travaux change les sections disponibles dans la fenêtre Method Explorer. Chaque nouvelle section contient uniquement les onglets et les sections de Method Editor utiles dans ce flux de travaux. Le changement d'un paramètre dans le flux de travaux modifie également le paramètre de la section correspondante dans les sections générales de Method Editor.

Deux onglets ne sont pas répétés dans les sections générales de Method Editor. La section **Chromatogram Peak Survey Workflow > Spectrum Peak Identification** et l'onglet **Chromatogram Peak Survey Workflow > Chromatogram Extraction > Chromatograms** sont inclus uniquement dans le flux de travaux Chromatogram Peak Survey. Ces sections affectent uniquement l'algorithme Chromatogram Peak Survey. Cet algorithme est utilisé uniquement dans ce flux de travaux et dans les actions **Chromatogram Peak Survey without Report** et **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report**.

Méthodes et présentations des flux de travaux

Des méthodes et des présentations supplémentaires par défaut sont fournies pour chaque flux de travaux.

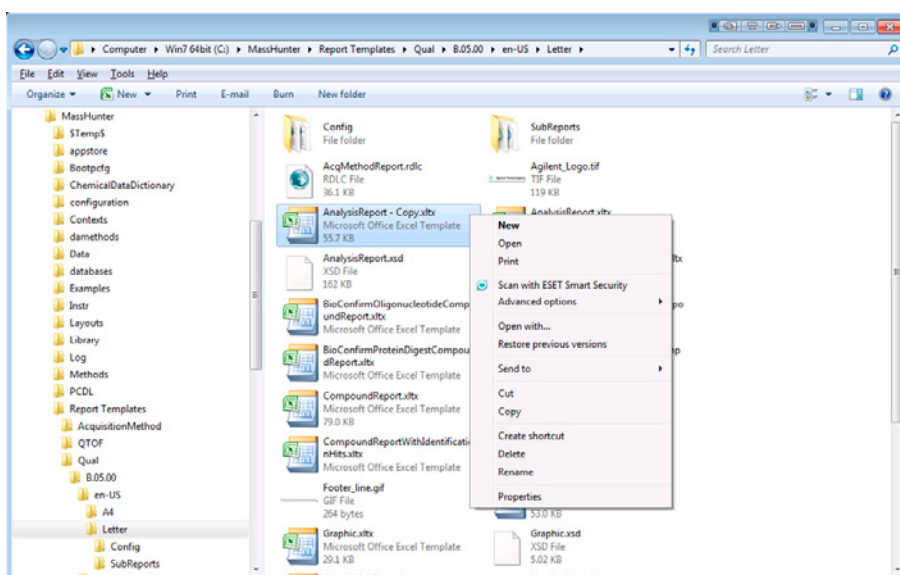
Flux de travaux	Méthode	Présentation	Section de l'éditeur de méthode
General	default.m	Default.xml	Aucune
BioConfirm Intact Protein	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm High Mass Intact Protein	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Small Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Large Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Protein Digest	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Synthetic Peptide	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm Workflow
Chromatogram Peak Survey	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	Chromatogram Peak Survey Workflow

Flux de travaux	Méthode	Présentation	Section de l'éditeur de méthode
Formula Confirmation and Sample Purity	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Formula Confirmation and Sample Purity Workflow
MS Target Compound Screening	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS Target Compound Screening Workflow
GC Q-TOF Compound Screening	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	GC/Q-TOF Compound Screening

Personnalisation d'un modèle de rapport

Consultez l'aide en ligne du module d'extension MassHunter Report Designer, le guide de familiarisation de Report Designer ou le DVD de formation sur la génération de rapports pour plus de détails sur la modification d'un modèle de rapport. Les étapes suivantes vous donnent un aperçu rapide de ce que signifie personnaliser un modèle.

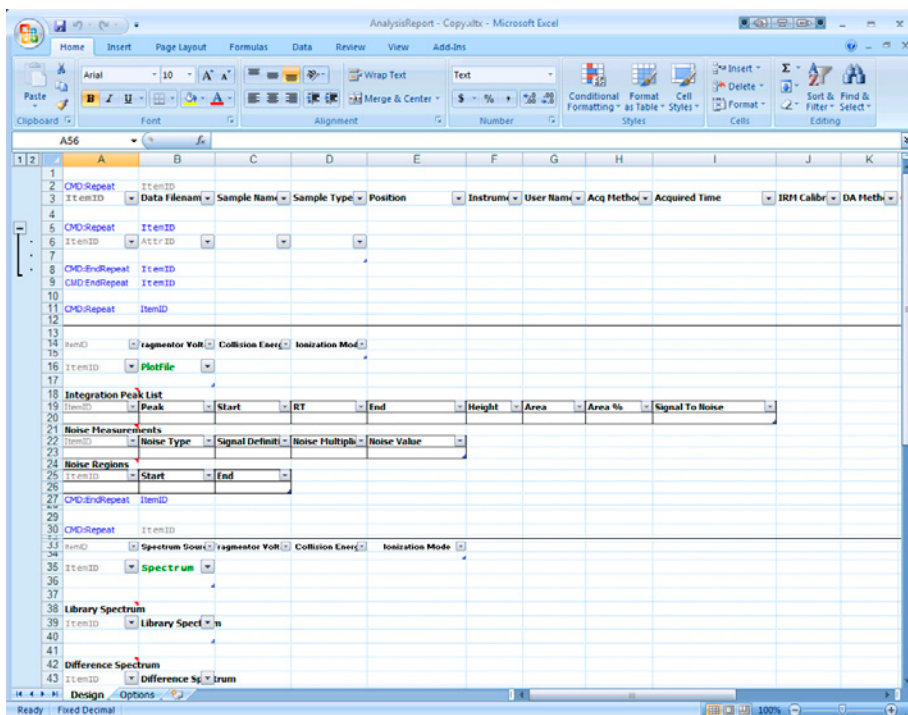
- 1 Accédez au dossier contenant les modèles de rapport. Par défaut, il s'agit du dossier:
\\MassHunter\\Report Templates\\Qual\\B.05.00\\en-US\\Letter. Vous pouvez sélectionner un autre dossier dans la fenêtre Method Explorer dans l'onglet General > Common Reporting Options > Templates.
- 2 Faites une copie du modèle que vous avez l'intention de modifier. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la copie et sélectionnez **Properties**. Si nécessaire, désélectionnez la case **Read-only**. Ensuite, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la copie et cliquez sur **Open** dans le menu contextuel.



L'ouverture du modèle de cette façon permet à Excel de savoir que ce fichier est un fichier modèle. Une fois le modèle ouvert, vous pouvez modifier les en-têtes et les pieds de page et ajouter, supprimer ou déplacer des colonnes de paramètres. Pour plus d'informations, reportez-vous à l'aide en ligne. Tous les modèles du programme Qualitative Analysis sont en lecture seule. Modifiez cette propriété avant d'éditer un modèle.

Personnalisation d'un modèle de rapport

De nombreux modèles sont installés avec le programme d'analyse qualitative. Reportez-vous à l'aide en ligne du programme pour plus d'informations sur le contenu de chaque modèle de rapport.



- 3 effectuez les changements souhaités.

Pour plus d'informations sur la procédure à suivre pour modifier un modèle, consultez l'aide en ligne du module d'extension MassHunter Report Designer ou le DVD de formation *Agilent MassHunter Reporting*.

- 4 Pour enregistrer le nouveau modèle, cliquez sur **Save** ou sur **Save As > Other Formats** à partir du bouton Microsoft Office.
- 5 Saisissez un nom d'identification et cliquez sur **Save**.

File name:	AnalysisReport - Copy.xlsx
Save as type:	Excel Template (*.xltx)

Contenu de ce manuel

Le présent manuel contient des informations destinées à vous apprendre à utiliser le Logiciel pour le poste de travail Agilent MassHunter – Analyse qualitative avec des données CPG/SM.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Révision A, novembre 2012



G3335-93147



Agilent Technologies