

Software Agilent MassHunter Workstation

Qualitative Analysis

**Guida conoscitiva per
GC/MS**



Agilent Technologies

Informazioni sul documento

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Nessuna parte di questo manuale può essere riprodotta in qualsiasi forma o mezzo (compresa la memorizzazione su supporti elettronici ed il recupero o la traduzione in lingua straniera) senza la preventiva autorizzazione scritta di Agilent Technologies, Inc. conformemente a quanto previsto dalle leggi in vigore negli Stati Uniti e da altre normative internazionali sul diritto d'autore.

Codice del manuale

G3335-94147

Edizione

Revisione A, Novembre 2012

Stampato in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051 USA

Microsoft[®], Windows 7[®] e Excel[®] sono marchi registrati di Microsoft Corporation negli Stati Uniti e/o in altri paesi.

Revisione software

Questa guida è valida per la revisione B.06.00 e le successive del programma Software Agilent MassHunter Workstation - Qualitative Analysis, fino alla sostituzione.

Garanzia

Le informazioni contenute in questo documento sono fornite allo stato corrente e sono soggette a modifiche senza preavviso nelle edizioni future. Inoltre, nei limiti massimi previsti dalla legge, Agilent non fornisce alcuna garanzia, esplicita o implicita, relativamente al presente manuale e alle informazioni in esso contenute, comprese, senza limitazione alcuna, le garanzie implicite di commerciabilità e di idoneità a un uso specifico. Agilent non sarà responsabile di errori o danni diretti o indiretti relativi alla fornitura, all'uso o alle prestazioni di questo documento o delle informazioni in esso contenute. In caso di separato accordo scritto fra Agilent e l'utente con diverse condizioni di garanzia relativamente al contenuto di questo documento in conflitto con le condizioni qui riportate, prevarranno le condizioni dell'accordo separato.

Licenze sulla tecnologia

I componenti hardware e/o software descritti in questo documento vengono forniti con licenza e possono essere utilizzati o copiati solo in conformità ai termini di tale licenza.

Legenda dei diritti limitati

Diritti limitati dal Governo degli Stati Uniti I diritti sul software e sui dati tecnici garantiti al governo federale includono solo i diritti concessi all'utente finale. Agilent fornisce al presente licenza commerciale per il software e i dati tecnici, come prescritto dalle normative FAR 12.211 (Technical Data) e 12.212 (Computer Software) e per il Dipartimento della Difesa, DFARS 252.227-7015 (Technical Data - Commercial Items) e DFARS 227.7202-3 (Rights in Commercial Computer Software or Computer Software Documentation).

Informazioni sulla sicurezza

ATTENZIONE

L'indicazione **ATTENZIONE** segnala un rischio. L'avviso richiama l'attenzione su una procedura operativa o una prassi che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare danni al prodotto o la perdita di dati importanti. In presenza della dicitura **ATTENZIONE** interrompere l'attività finché le condizioni indicate non siano state perfettamente comprese e soddisfatte.

AVVISO

L'indicazione **AVVERTENZA** segnala un rischio. L'avviso richiama l'attenzione su una procedura operativa o una prassi che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare lesioni personali o morte. In presenza della dicitura **AVVERTENZA** interrompere l'attività finché le condizioni indicate non siano state perfettamente comprese e soddisfatte.

In questa Guida...

Questa guida contiene informazioni sull'utilizzo dei dati Software Agilent MassHunter Workstation - Qualitative Analysis GC/MS.

Prima di iniziare con le esercitazioni, leggere le istruzioni in “Prima di iniziare con le esercitazioni...” a pagina 5.

Esercitazione 1 Concetti base di analisi qualitativa

Questa esercitazione consente di esplorare molte delle importanti funzionalità del programma Qualitative Analysis. Queste attività sono essenziali, indipendentemente dal tipo di dati utilizzati.

Esercitazione 2 Ricerca e identificazione

Nelle prime due serie di operazioni, si trovano e identificano sulfonamidi a bassa concentrazione all'interno di una complessa matrice e si genera la loro formula per i dati sia TOF che Q-TOF. Si esegue anche un'estrazione molecolare sulla digestione di una proteina con dati sia TOF che Q-TOF. Queste operazioni possono essere eseguite anche su dati a triplo quadruplo.

Esercitazione 3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

In queste attività viene spiegato come impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa. Viene anche spiegato come modificare un metodo per automatizzare l'analisi e/o l'identificazione del composto. All'apertura del file di dati, vengono eseguite le azioni all'interno del metodo automatico. Viene inoltre spiegato come creare un metodo per eseguire azioni automatizzate con una lista di lavoro. Tutte queste attività sono eseguite utilizzando un workflow diverso.

Riferimenti

Questo capitolo tratta i concetti base del programma Qualitative Analysis.

Novità

in B.06.00

- È possibile rivedere i composti in Compound Details View. In Compound Details View sono state aggiunte altre quattro finestre.
- Per Compound Details View, è possibile definire linee diverse a seconda del tipo di cromatogramma e spettro.
- È disponibile l'algoritmo Find Compounds by Integration.
- È possibile eseguire la ricerca in più librerie utilizzando l'algoritmo Search Unit Mass Library.
- Nell'algoritmo Generate Formulas, è possibile aggiungere delle formule ai picchi dello spettro con frammenti. L'annotazione del frammento avviene selezionando gli spettri da annotare sulla base dell'algoritmo di estrazione del composto.
- L'algoritmo Generate Formulas può essere eseguito su composti trovati mediante l'algoritmo Find by Chromatogram Deconvolution.
- L'algoritmo Generate Formula è stato modificato e consente ora di inserire un numero massimo di risultati per ciascun portatore di carica.
- Nell'algoritmo Generate Formulas, è possibile raggruppare risultati con la stessa formula e portatori di carica diversi.
- È possibile creare i composti da un qualsiasi spettro utente. L'algoritmo di estrazione del composto per questi composti è "Spectrum Extraction".
- Durante il salvataggio dei dati e del file di dati, è possibile decidere se salvare tutti i risultati dei composti oppure una piccola parte per ciascun composto. Tutti i cromatogrammi e gli spettri utente vengono sempre salvati.
- Il formato del file CEF è stato modificato in modo da consentire l'inserimento di più informazioni.
- Le informazioni su m/z e specie di ioni sono disponibili nel primo livello della tabella Spectrum Identification Results.
- La tabella Spectrum Identification è stata modificata. È possibile aggiungere un filtro ad una colonna ed è possibile eliminare una riga.
- Con Formula & Ion Species ora è possibile etichettare un picco.
- Ora, modificare lo spettro identificato con Best nella finestra Spectrum Identification Results è un'operazione molto più veloce anche quando il numero di inserimenti è elevato.

- È possibile specificare di sovrapporre i cromatogrammi dei composti in Compound Report.
- Il modello di rapporto predefinito Formula Confirmation è stato modificato e ora può includere la colonna colorata Flags (Tgt) e la tabella Fragment con la colonna colorata Flags (FIs).

Prima di iniziare con le esercitazioni...

- Installare il software. Consultare la Guida di installazione per le istruzioni.
- Copiare la cartella **Data** dal disco di installazione e decomprimerla sul disco rigido.

In questa cartella sono contenuti tutti i file di dati necessari per le esercitazioni. Estrarre innanzitutto i file di dati dalla cartella in formato .zip.

NOTE

Non riutilizzare i file di dati d'esempio che si trovano sul sistema a meno che siano stati copiati dagli originali su disco e non siano stati utilizzati da altri utenti. Se i file di dati d'esempio sul sistema non sono identici agli originali su disco, i risultati che si otterranno durante le esercitazioni non saranno paragonali a quelli illustrati in questa guida.

Indice

Esercitazione 1 Concetti base di analisi qualitativa 9

- Attività 1. Aprire il programma Qualitative Analysis 10
- Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS 12
- Attività 3. Ingrandire e ridurre il cromatogramma 15
- Attività 4. Ancorare un cromatogramma 16
- Attività 5. Modificare i layout delle finestre 17
- Attività 6. Estrarre i cromatogrammi 19
- Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo 21
- Attività 8. Calcolare i valori di idoneità del sistema 26
- Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma 29
- Attività 10. Aggiungere annotazioni 39
- Attività 11. Aggiungere un calibro della massa 43

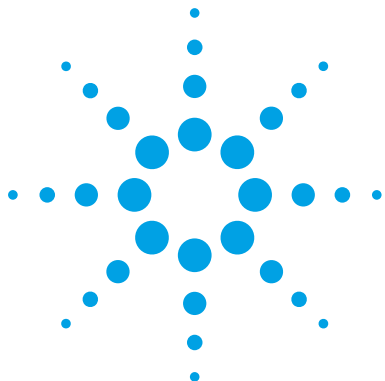
Esercitazione 2 Ricerca e identificazione 45

- Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica 46
- Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library 50
- Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM) 53
- Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione 56
- Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco 59
- Attività 17. Salvare i risultati 64

Esercitazione 3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa 69

- Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General 70
- Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening 75
- Attività 20. Esportare un file CEF 79
- Attività 21. Stampare un rapporto di analisi 80
- Attività 22. Stampare un rapporto sui composti 84

Riferimenti	87
Utilizzo delle finestre	88
Utilizzo dei risultati di Data Navigator	91
Operazioni sul cromatogramma	92
Operazioni su uno spettro MS o MS/MS	93
Utilizzo dei dati cromatografici visualizzati	94
Utilizzo dei dati sugli spettri visualizzati	95
Workflow	97
Personalizzazione del modello di un rapporto	100



1

Concetti base di analisi qualitativa

Attività 1. Aprire il programma Qualitative Analysis	10
Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS	12
Attività 3. Ingrandire e ridurre il cromatogramma	15
Attività 4. Ancorare un cromatogramma	16
Attività 5. Modificare i layout delle finestre	17
Attività 6. Estrarre i cromatogrammi	19
Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo	21
Attività 8. Calcolare i valori di idoneità del sistema	26
Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma	29
Attività 10. Aggiungere annotazioni	39
Attività 11. Aggiungere un calibro della massa	43

Questa esercitazione consente di esplorare molte delle importanti funzionalità del programma Qualitative Analysis e utilizzare i dati GC/Q-TOF e GC/QQQ

Ciascuna esercitazione è riassunta in una tabella di tre colonne:

- **Passi** - Seguire tali istruzioni generali per procedere da soli e scoprire il programma.
- **Istruzioni dettagliate** - Seguire queste istruzioni in caso di dubbio o se si preferisce procedere gradatamente alla conoscenza del programma.
- **Commenti** – Consigli e informazioni aggiuntive su ciascun passo dell'esercitazione.




1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 1. Aprire il programma Qualitative Analysis

Attività 1. Aprire il programma Qualitative Analysis

In questa attività, si utilizza il metodo corrente per aprire più file di dati.

Attività 1. Apertura del programma Qualitative Analysis con più file di dati

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Aprire il programma Qualitative Analysis.</p> <ul style="list-style-type: none">Aprire il file di dati Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d e MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella \\MassHunter\Data, o nella cartella in cui sono stati copiati.	<p>a Fare doppio clic sull'icona Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00  . Si apre la finestra di dialogo Open Data Files.</p> <p>b Scorrere fino alla cartella \\ MassHunter\Data\GC o la cartella in cui si trovano i file di esempio.</p>	<ul style="list-style-type: none">Il file Pest - 200 - Scan.d contiene dati MS, i file Pest - STD 200 MRM.d e Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d contengono sia i dati MS che MS/MS (tutti i dati GC/QQQ). Il file MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d contiene i dati GC/Q-TOF.In caso di ulteriori informazioni sulla maggior parte delle finestre, delle finestre di dialogo e delle schede, premere il tasto F1 quando la finestra è attiva.

- Controllare che l'opzione **Use current method** sia selezionata.
- Controllare che la casella di controllo **Load result data** non sia contrassegnata. Se la casella **Load result data** non è disponibile, i risultati non sono stati salvati nel file di dati. Per informazioni sul salvataggio dei risultati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64.
- Verificare che la casella di controllo **Run 'File Open' actions from selected method** non sia selezionata.

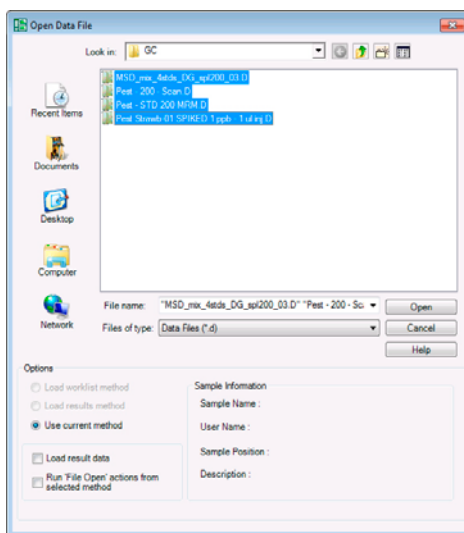



Figura 1 Apertura dei file di dati all'avvio del software

Attività 1. Apertura del programma Qualitative Analysis con più file di dati (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
	<p>c Tenere premuto il tasto Shift e fare clic su Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d e MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>d Fare clic su Open. Nella finestra Data Navigator vengono visualizzati i quattro file di dati, mentre nella finestra Chromatogram Results compaiono da 1 a 3 cromatogrammi.</p> <p>e Fare clic sull'icona List Mode  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Premendo il tasto Ctrl, è possibile trascinare i file non attigui uno all'altro nell'elenco. • Quel che viene visualizzato ora nella finestra varia a seconda delle impostazioni definite per metodo, layout, visualizzazione e tracciato prima dell'apertura di questi file. • Selezionando l'icona List Mode, lo sfondo dell'icona diventa arancione.

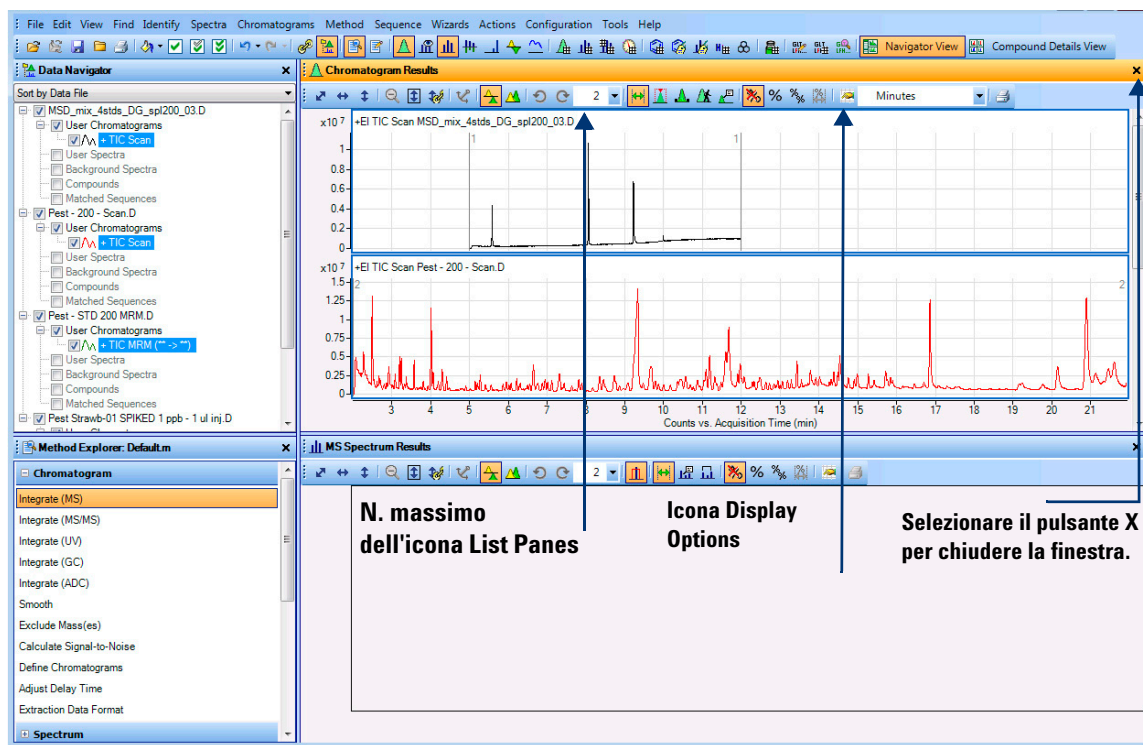


Figura 2 Caricamento della finestra principale di Qualitative Analysis con workflow GC/Q-TOF Compound Screening



1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS

In questa attività, è possibile selezionare il workflow General (per operatori GC/QQQ) o il workflow GC/Q-TOF Compound Screening (per operatori GC/Q-TOF). Questi workflow sono gli unici due che consentono di analizzare i dati GC/MS. Quindi, aprire la finestra di dialogo User Interface Configuration e selezionare la casella di controllo appropriata per un sistema GC/QQQ o un sistema GC/Q-TOF.

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per GC

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Se necessario, aprire il programma Qualitative Analysis.	<p>a Fare doppio clic sull'icona Agilent MassHunter Qualitative Analysis . Si apre la finestra di dialogo Open Data Files.</p> <p>b Fare clic su Cancel nella finestra di dialogo Open Data Files.</p>	<ul style="list-style-type: none">• In caso di ulteriori informazioni su finestre, finestre di dialogo le schede, premere il tasto F1 quando la finestra è attiva.
2 Scegliere il workflow General o il workflow GC/Q-TOF Compound Screening.	<p>a Se si possiede uno strumento GC/QQQ, fare clic sul comando Configuration > Configure for Workflow > General. Se si possiede uno strumento GC/Q-TOF, fare clic sul comando Configuration > Configure for Workflow > GC/Q-TOF Compound Screening.</p> <p>b Fare clic sul pulsante Load workflow's default method e il pulsante Load workflow's default layout.</p> <p>c Fare clic su OK.</p> <p>d Fare clic sull'icona List Mode  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Se il programma Data Acquisition per GC/QQQ o GC/Q-TOF è installato sullo stesso computer, il software configura l'interfaccia utente automaticamente. È possibile che la sezione GC/Q-TOF Compound Screening sia già disponibile nella finestra Method Explorer.• Per impostazione predefinita, i cromatogrammi vengono sovrapposti. Per questi esempi, i cromatogrammi vengono visualizzati in List Mode.

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per GC

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
3	<p>Se si dispone di un GC/QQQ, configurare l'interfaccia utente in modo da visualizzare solo le funzioni di GC/QQQ.</p> <p>a Selezionare Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b In Separation types, selezionare solo la casella di controllo GC.</p> <p>c Se si dispone di uno strumento GC/QQQ, in Ionization type, contrassegnare anche la casella di controllo El or other "hard" ionization technique e deselezionare la casella CI, APCI, ESI, MALDI or other "soft" ionization technique.</p> <p>d In Mass accuracy, deselezionare la casella di controllo Accurate mass (TOF, Q-TOF). Contrassegnare la casella di controllo Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>e In Optional software features, deselezionare la casella di controllo Peptide Sequence Editor e selezionare la casella BioConfirm Software.</p> <p>f In Non-MS detectors, deselezionare le caselle UV e ADC.</p> <p>g Contrassegnare la casella Show advanced parameters.</p> <p>h Fare clic su OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • I comandi nella finestra di dialogo User Interface Configuration vengono modificati. • Se una funzione non è visibile, con ogni probabilità è stata nascosta nel momento in cui è stata deselezionata una casella di controllo nella finestra di dialogo User Interface Configuration.

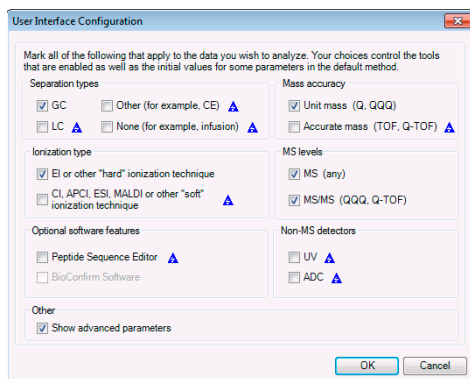


Figura 3 Configurazione dell'interfaccia utente per utilizzare i dati GC/QQQ

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS

Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per GC

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
4	<p>Se si dispone di un GC/Q-TOF, configurare l'interfaccia utente in modo da visualizzare solo le funzioni di GC/Q-TOF.</p>	<ul style="list-style-type: none">• I comandi nella finestra di dialogo User Interface Configuration vengono modificati.• Se una funzione non è visibile, con ogni probabilità è stata nascosta nel momento in cui è stata deselezionata una casella di controllo nella finestra di dialogo User Interface Configuration.
	<p>a Selezionare Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b In Separation types, selezionare solo la casella di controllo GC.</p> <p>c In Ionization type, selezionare le due caselle di controllo.</p> <p>d In MS levels, selezionare le due caselle di controllo.</p> <p>e In Mass accuracy, selezionare la casella di controllo Accurate mass (TOF, Q-TOF). Non selezionare la casella di controllo Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>f In Optional software features, deselezionare la casella di controllo Peptide Sequence Editor e selezionare la casella BioConfirm Software.</p> <p>g In Non-MS detectors, deselezionare le caselle UV e ADC.</p> <p>h Contrassegnare la casella Show advanced parameters.</p> <p>i Fare clic su OK.</p>	

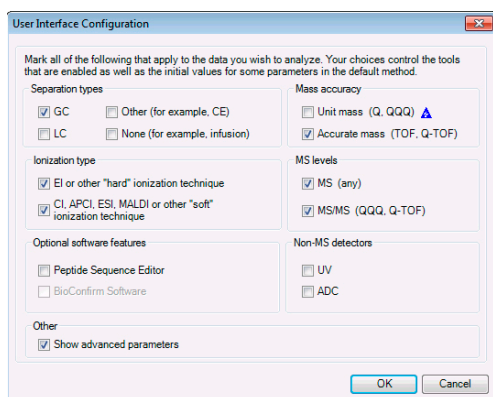


Figura 4 Configurazione dell'interfaccia utente per GC/Q-TOF

Attività 3. Ingrandire e ridurre il cromatogramma

In questa attività si approfondiscono le funzioni di ingrandimento e di riduzione del programma Qualitative Analysis.

Attività 4. Ancorare un cromatogramma

In questa attività viene ancorato un cromatogramma. Quando un cromatogramma viene ancorato, tale cromatogramma rimane costantemente sul display mentre si scorrono gli altri cromatogrammi da visualizzare.

Attività 4. Ancorare un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<ul style="list-style-type: none">Ancorare un cromatogramma.<ul style="list-style-type: none">Visualizzare tutti i cromatogrammi.Controllare che l'elenco di visualizzazione del cromatogramma sia impostato su 1.Nella finestra Chromatogram Results, selezionare il secondo TIC.Ancorare questo TIC.Scorrere l'elenco dei cromatogrammi.Eliminare l'ancoraggio.	<ol style="list-style-type: none">In Data Navigator, selezionare le caselle di controllo relative ai cromatogrammi nascosti nell'attività precedente.Controllare che il numero massimo di riquadri nella finestra Chromatogram Results sia impostato su 1.Nella finestra Chromatogram Results, selezionare il secondo TIC.Fare clic con il tasto destro del mouse all'interno del cromatogramma, quindi selezionare Set Anchor.Utilizzando la barra di scorrimento nella finestra Chromatogram Results, scorrere l'elenco dei cromatogrammi. Il secondo TIC rimane sempre visualizzato come primo cromatogramma.Selezionare Chromatograms > Clear Anchor.	<ul style="list-style-type: none">Quando un cromatogramma viene ancorato, appare l'icona di un'ancora nella finestra Data Navigator, a fianco del nome del cromatogramma ancorato.Nonostante l'elenco di visualizzazione ne indichi 1, nella finestra Chromatogram Results vengono visualizzati comunque due cromatogrammi dopo averne ancorato uno. Questo perché viene visualizzato un cromatogramma oltre a quello ancorato.È inoltre possibile fare clic con il tasto destro del mouse sul cromatogramma e selezionare Clear Anchor dal menu di scelta rapida.

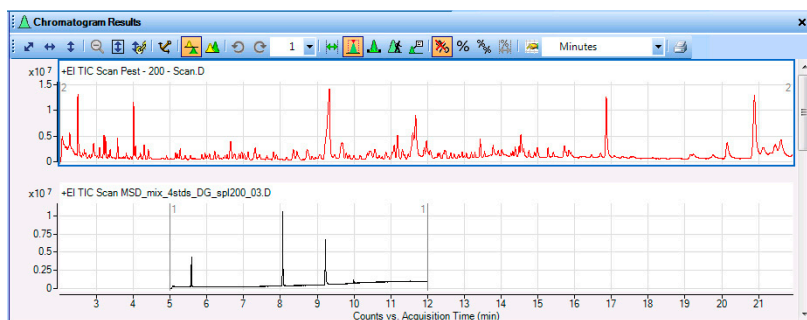


Figura 5 TIC ancorato nella finestra Chromatogram Results

Attività 5. Modificare i layout delle finestre

In questa attività, le finestre vengono spostate all'interno della vista principale e vengono creati altri layout.

Attività 5. Modificare il layout delle finestre

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Modificare il layout delle finestre:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modificare la dimensione della finestra. • Salvare il layout di una finestra • Sbloccare il layout. • Modificare la finestra Chromatogram Results perché possa essere mobile. • Spostare la finestra Chromatogram Results. • Visualizzare gli strumenti per riposizionare le finestre. 	<ul style="list-style-type: none"> • Per modificare la dimensione di una finestra, trascinare la linea divisoria tra le finestre. • Per salvare il layout di una finestra, selezionare Configuration > Window Layouts > Save Layout. • Per sbloccare un layout, selezionare Configuration > Window Layouts > Lock Layout. • Per rendere mobile una finestra, fare clic con il tasto destro del mouse sulla barra del titolo e selezionare Floating dal menu di scelta rapida. • Per spostare una finestra, selezionare la barra del titolo della finestra e trascinare la finestra nella posizione desiderata. • Per visualizzare gli strumenti di riposizionamento, trascinare la finestra sopra una delle altre finestre. Dopo averle sovrapposte, il programma visualizza diversi strumenti di layout, come quelli nella Figura 6. 	<ul style="list-style-type: none"> • Se il layout è sbloccato, non compare un segno di spunta a fianco del menu Lock Layout. • Gli strumenti di riposizionamento possono essere utilizzati soltanto se il layout non è bloccato. • Inoltre, è possibile rendere mobile una finestra facendo doppio clic sulla barra del titolo della finestra. • Il software dispone di diversi layout predefiniti. Tuttavia è possibile caricarne degli altri. • Il software offre vari workflow, ciascuno dei quali carica un layout diverso. Passando ad un workflow diverso, si modifica anche il layout.

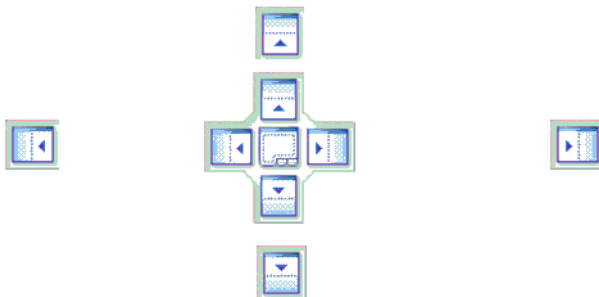


Figura 6 Strumenti di riposizionamento delle finestre

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 5. Modificare i layout delle finestre

Attività 5. Modificare il layout delle finestre (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>2 Riposizionare la finestra Chromatogram Results.</p> <ul style="list-style-type: none">• Spostare la finestra in alto, a sinistra, a destra e in basso rispetto alle altre finestre.• Spostare due finestre contemporaneamente in modo che siano una sopra all'altra e che siano disponibile dalle schede in basso.• Ripristinare il layout predefinito.	<ul style="list-style-type: none">• Se si trascina il cursore su una delle icone più piccole, la finestra trascinata sarà posizionata sopra, a destra, sotto o a sinistra rispetto alle altre finestre.• Trascinare il cursore sull'icona più grande. La finestra può essere posizionata sopra, a destra, sotto o a sinistra rispetto all'altra finestra anche trascinando il cursore sugli angoli dell'icona più grande.• Per tabulare insieme due finestre, trascinare il cursore sul centro dell'icona più grande. Verrà visualizzata una versione shadow delle due finestre tabulate. Non trascinare più il mouse. Le due finestre verranno tabulate insieme.• Selezionare Configuration > Window Layouts > Restore Default Layout.	<ul style="list-style-type: none">• Il cursore si deve trovare su una delle frecce di una casella affinché sia possibile riposizionare le finestre.• Selezionando il comando Restore Default Layout viene ripristinato il layout utilizzato nel workflow General e nel workflow GC/Q-TOF Compound Screening. Se si sta utilizzando un altro tipo di workflow, caricare il layout di quel workflow.

Attività 6. Estrarre i cromatogrammi

In questa attività, i cromatogrammi vengono estratti dal TIC originale e poi uniti.

Attività 6. Estrarre i cromatogrammi

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Estrarre e unire i cromatogrammi degli ioni estratti (EIC) dalle due masse nel file dati Pest - 200 Scan.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> I valori m/z sono 129.0 e 414.2. Non unire i picchi delle singole masse in un cromatogramma. 	<p>a Nella finestra Data Navigator, deselezionare le caselle di controllo dei file di dati eccetto per Pest - 200 Scan.d.</p> <p>b Aprire la finestra di dialogo Extract Chromatograms utilizzando l'opzione sotto o una delle opzioni sulla destra:</p> <ul style="list-style-type: none"> Selezionare Chromatograms > Extract Chromatograms. <p>c In List of opened data files, selezionare Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>d Nella casella di riepilogo Type, selezionare EIC.</p> <p>e Nel campo m/z value(s), digitare 129.0, 414.2</p> <p>f Se necessario, deselezionare la casella di controllo Merge multiple masses into one chromatogram per fondere gli EIC.</p> <p>g Fare clic su OK.</p> <p>h Impostare Maximum number of list panes su 3 nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> I cromatogrammi possono essere estratti anche in uno dei seguenti modi: <ul style="list-style-type: none"> Fare clic con il tasto destro del mouse all'interno del cromatogramma, quindi selezionare Extract Chromatograms. Da Data Navigator, evidenziare TIC Scan per sulfas_PosMS.d, quindi selezionare TIC Scan e fare clic su Extract Chromatograms. È possibile utilizzare un livello MS di Tutto o di MS. È inoltre possibile decidere che i cromatogrammi estratti siano automaticamente integrati dopo l'estrazione. Un cromatogramma può inoltre essere estratto da uno spettro di massa.

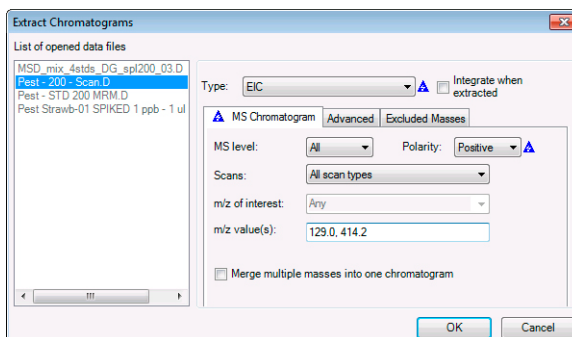


Figura 7 Finestra di dialogo Extract Chromatograms

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 6. Estrarre i cromatogrammi

Attività 6. Estrarre i cromatogrammi (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------

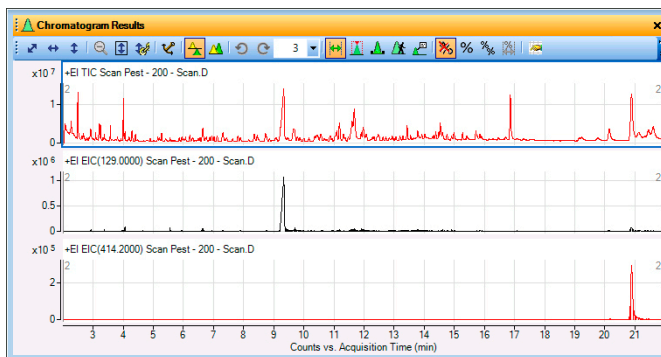


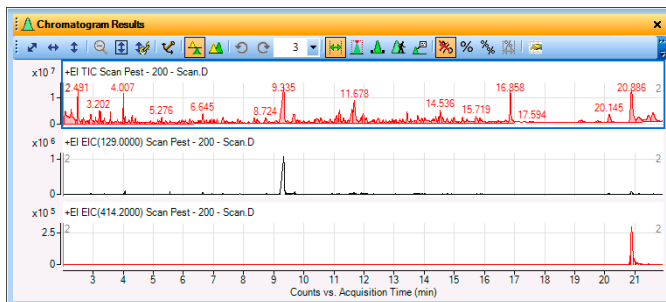
Figura 8 Unione dei cromatogrammi degli ioni estratti (EIC) a confronto con il TIC originale

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo

In questa attività si spiegano i vari modi per integrare un cromatogramma, modificare i parametri di integrazione per variare i risultati e calcolare il segnale /rumore dei picchi integrati per i dati MS/MS.

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Integrare il cromatogramma TIC Scan per il file di dati Pest - 200 - Scan.d utilizzando una delle opzioni elencate a destra.	<p>a Selezionare il file di dati Pest - 200 - Scan.D nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Evidenziare il cromatogramma TIC Scan e utilizzare uno dei seguenti comandi:</p> <ul style="list-style-type: none"> Dalla barra dei menu, selezionare Chromatograms > Integrate Chromatogram. Fare clic con il tasto destro del mouse in un punto qualsiasi della finestra del cromatogramma, quindi selezionare Integrate Chromatogram. Nella finestra Data Navigator, selezionare Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms > TIC Scan, quindi selezionare con il tasto destro TIC SCAN e poi Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> Il programma ha in pratica integrato tutti i picchi del cromatogramma. Selezionare l'integrazione per utilizzare i dati MS, MS/MS e GC nella finestra Method Editor. In questo caso si tratta di un cromatogramma MS. Pertanto i valori impostati nella sezione Integrate (MS) di Method Editor vengono utilizzati per integrare questo cromatogramma.
2 Visualizzare solo due cromatogrammi per volta.	<ul style="list-style-type: none"> Selezionare 2 nella casella Maximum number of list panes della barra degli strumenti Chromatogram Results. 	



Integrazione di molti piccoli picchi.

Figura 9 Integrazione del cromatogramma TIC Scan con molti piccoli picchi

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
3 Modificare la soglia per integrare meno picchi. <ul style="list-style-type: none">• Modificare la soglia per rilevare solo i tre picchi maggiori.	a Dalla finestra Method Explorer, selezionare Chromatogram > Integrate (MS) per visualizzare la scheda Integrate (MS). b Selezionare l'integratore Agile . c Selezionare la scheda Peak Filters . d In Maximum number of peaks, selezionare Limit (by height) to the largest , e digitare 3.	<ul style="list-style-type: none">• Un triangolo blu compare se si modifica un'impostazione rispetto al valore salvato nel metodo corrente. Il triangolo scompare, quando si salva il metodo.

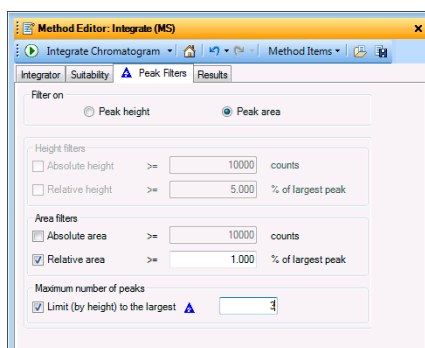



Figura 10 Scheda Peak Filters con casella **Limit (by height) to the largest** selezionata

4 Reintegrare il cromatogramma	e Fare clic sul pulsante  nella barra degli strumenti Method Editor per integrare il cromatogramma utilizzando la nuova impostazione.	<ul style="list-style-type: none">• Notare che ora vengono integrati solo i tre picchi maggiori.• Il picco a 2.491 minuti ha un'altezza maggiore rispetto al picco a 16.858 minuti. Pertanto viene indicato come terzo picco.
---------------------------------------	---	--

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------

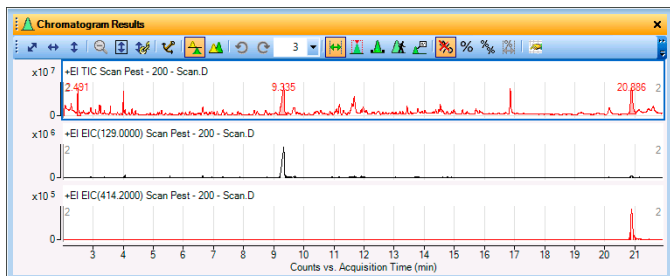


Figura 11 Integrazione del cromatogramma TIC Scan dopo aver limitato il numero di picchi

5 Integrare il cromatogramma TIC MRM per il file di dati **Pest - STD 200 MRM.D**.

- a** Nella finestra Data Navigator, selezionare **TIC MRM** per il file di dati Pest - STD 200 MRM.d.
- b** Utilizzare uno dei seguenti comandi per integrare i cromatogrammi.
 - Dalla barra dei menu, selezionare **Chromatograms > Integrate Chromatogram**.
 - Fare clic con il tasto destro del mouse in un punto qualsiasi della finestra del cromatogramma, quindi selezionare **Integrate Chromatogram**.
 - Nella finestra Data Navigator, selezionare con il tasto destro il cromatogramma evidenziato e fare clic su **Integrate Chromatogram**.
- c** Passare da 5,8 a 8,5 minuti.
- d** Impostare **Maximum number of list panes** su 2.

- Premere il tasto **Ctrl** per evidenziare più di un cromatogramma nella finestra Data Navigator.
- Il programma ha in pratica integrato tutti i picchi del cromatogramma.
- In questo caso si tratta di cromatogrammi MS/MS. Pertanto i valori impostati nella sezione Integrate (MS/MS) di Method Editor vengono utilizzati per integrare questo cromatogramma. È possibile selezionare un integratore per integrare i cromatogrammi MS e utilizzarne un altro per integrare i cromatogrammi MS/MS.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo

Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------

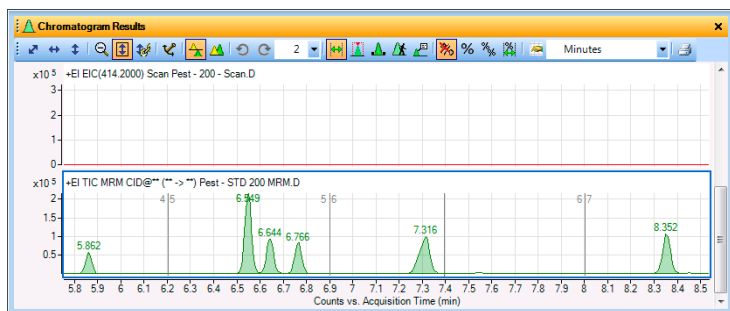


Figura 12 Integrazione di cromatogrammi MRM

6 Selezionare l'integratore **MS/MS (GC)**. Modificare il filtro in modo che siano accettati solo i picchi con altezza assoluta maggiore o uguale a 20.000.

- Nella finestra Method Explorer, selezionare **Chromatogram > Integrate (MS/MS)**.
- Selezionare **MS/MS (GC)** come **Integrator**.
- Selezionare la scheda **Peak Filters**.
- In **Filter on**, selezionare **Peak height**.
- In Height filters, contrassegnare la casella di controllo **Absolute height**.
- Digitare **60000** come **Absolute height**.

- Un triangolo blu compare se si modifica un'impostazione rispetto al valore salvato nel metodo corrente. Il triangolo scompare, quando si salva il metodo.

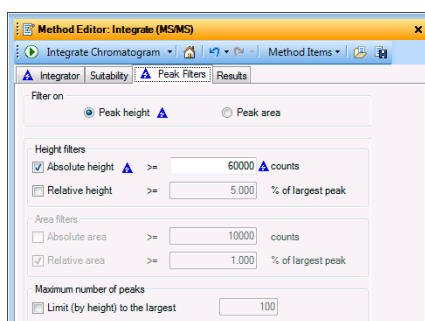

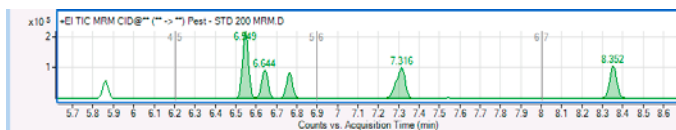


Figura 13 Scheda Peak Filters con casella **Absolute height** contrassegnata




Attività 7. Integrare un cromatogramma GC/MS in modo interattivo (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti	
7	Reintegrare il cromatogramma	g Fare clic sul pulsante  nella barra degli strumenti Method Editor.	<ul style="list-style-type: none"> Notare che ora vengono integrati solo i picchi maggiori.



Il picco più basso di 5,8 minuti non è più compreso tra i risultati dell'integrazione poiché l'altezza assoluta per questo picco è inferiore a 60.000 conteggi.

Figura 14 Integrazione dei cromatogrammi TIC e EIC MS/MS con impostazione di una soglia più alta

8	Ripristinare i valori salvati per il metodo corrente e chiudere Method Editor.	<p>a Selezionare la sezione Chromatogram > Integrate (MS/MS) in Method Explorer.</p> <p>b Selezionare l'icona  in Method Editor.</p> <p>c Selezionare la sezione Chromatogram > Integrate (MS) in Method Explorer.</p> <p>d Selezionare l'icona  in Method Editor.</p> <p>e Chiudere la finestra Method Editor.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Per annullare le modifiche e ripristinare i valori del metodo caricato, fare clic sull'icona Restore to last saved values from file  nella barra degli strumenti Method Editor.
9	Eliminare tutti i cromatogrammi eccetto quello originale. Eliminare i risultati dell'integrazione dal cromatogramma originale.	<p>a In User Chromatograms nella finestra Data Navigator, evidenziare tutti i cromatogrammi eccetto l'originale.</p> <p>b Selezionare con il tasto destro i cromatogrammi evidenziati, quindi selezionare Delete.</p> <p>c Selezionare tutti i cromatogrammi TIC.</p> <p>d Selezionare Chromatograms > Clear Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Usando il comando Clear Results, i cromatogrammi non vengono eliminati. Vengono rimossi i risultati relativi ai cromatogrammi. In questo caso vengono cancellati i valori dell'integrazione.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 8. Calcolare i valori di idoneità del sistema

Attività 8. Calcolare i valori di idoneità del sistema

In questa attività si spiegano i vari modi per integrare in modo interattivo un cromatogramma, modificare i parametri di integrazione per variare i risultati e visualizzare il segnale/rumore per ciascun picco. Sono inoltre disponibili informazioni sull'attivazione dei calcoli di idoneità del sistema.

Attività 8. Integrare un cromatogramma (MS) in modo interattivo

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Integrare il cromatogramma MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d e Pest - 200 - Scan.d utilizzando una delle opzioni elencate a destra.	<p>a Contrassegnare la casella di controllo a fianco dei file di dati MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Contrassegnare la casella di controllo a fianco dei file di dati Pest - 200 - Scan.d nella finestra Data Navigator.</p> <p>c Evidenziare i due TIC.</p> <p>d Integrare il cromatogramma TIC Scan per questi due file utilizzando una delle seguenti opzioni.</p> <ul style="list-style-type: none">• Dal menu principale, selezionare Chromatograms > Integrate Chromatogram.• Evidenziare il cromatogramma. Quindi, selezionare con il tasto destro il cromatogramma, e selezionare Integrate Chromatogram.• In Data Navigator, evidenziare TIC Scan per i due file di dati. Quindi, selezionare con il tasto destro il cromatogramma, e selezionare Integrate Chromatogram.	<ul style="list-style-type: none">• Per il workflow General, l'integrazione utilizza l'integratore General perché è il tipo selezionato nel metodo default.m. Per il workflow GC/Q-TOF Compound Screening, l'integrazione utilizza l'integratore Agile.• È possibile modificare questo valore nella scheda Chromatogram > Integrate (MS) > Integrator.• Ricordare che l'integrazione rileva picchi multi picchi mantenendo i parametri predefiniti.

Attività 8. Integrare un cromatogramma (MS) in modo interattivo (segue)

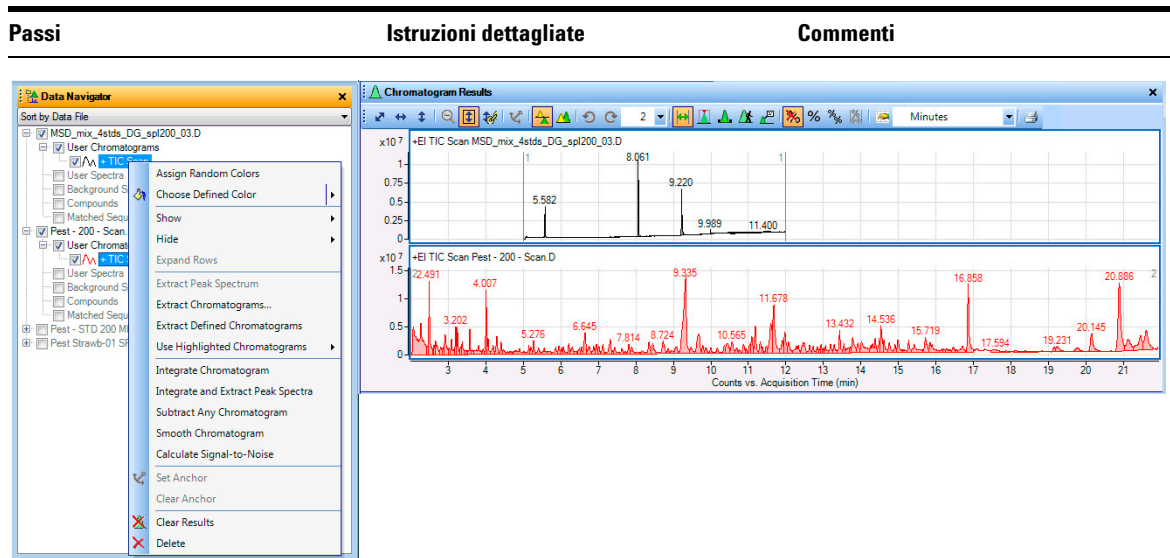
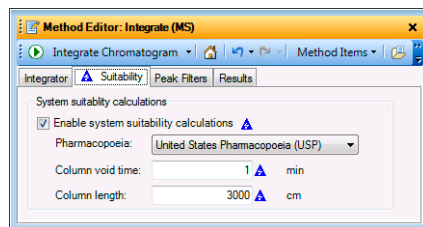


Figura 15 Uno dei menu di scelta rapida in Data Navigator e i cromatogrammi integrati

2 Attivare i calcoli di idoneità del sistema per i cromatogrammi MS.

- a Dal Method Explorer, selezionare **Chromatogram > Integrate (MS)** per visualizzare la scheda Integrator.
- b Selezionare la scheda **Suitability**.
- c Contrassegnare **Enable system suitability calculations**.
- d Selezionare **United States Pharmacopoeia (USP)**.
- e Nella casella **Column void time**, digitare 1.
- f Nella casella **Column length**, digitare 3000.

- Un triangolo blu compare se si modifica un'impostazione rispetto al valore salvato nel metodo corrente. Il triangolo scompare, quando si salva il metodo.
- Gli algoritmi utilizzati per impostare alcune delle colonne in Peak List variano a seconda del tipo di farmacopea selezionato. Consultare la Guida in linea per ulteriori informazioni.




Il tempo di validità e la lunghezza effettivi della colonna per questi file di dati sono diversi rispetto a questi valori. Questi sono valori di esempio.

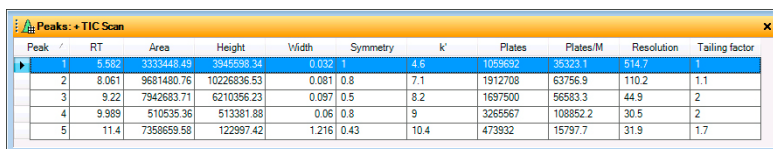
Figura 16 Scheda Chromatogram > Integrate (MS) Suitability

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 8. Calcolare i valori di idoneità del sistema


Attività 8. Integrare un cromatogramma (MS) in modo interattivo (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
3 Reintegrare il cromatogramma.	<ul style="list-style-type: none">Fare clic sull'icona Integrate Chromatogram  nella barra degli strumenti Method Editor per integrare il cromatogramma utilizzando la nuova impostazione.	
4 Visualizzare i calcoli di idoneità del sistema. <ul style="list-style-type: none">Aprire la finestra Integration Peak List.Rivedere i valori della finestra del rumore e calcolare il rapporto segnale/rumore per i picchi integrati.	<ol style="list-style-type: none">Selezionare View > Integration Peak List.Selezionare con il tasto destro l'intestazione della finestra Peaks e fare clic su Floating.Fare clic con il destro sull'intestazione di una delle colonne da visualizzare e selezionare Remove Column.Fare clic con il destro sull'intestazione di colonna e selezionare Add/Remove Columns per modificare le colonne visibili.	<ul style="list-style-type: none">I calcoli di idoneità del sistema vengono inclusi nella tabella Integration Peak List.I valori includono k', fattore di coda, piastre, piastre/M e simmetria.È inoltre possibile attivare i calcoli di idoneità del sistema per un cromatogramma MS, MS/MS e GC.



Peak	RT	Area	Height	Width	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.582	3333448.49	3949599.34	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	510535.36	513381.88	0.06	0.8	9	3265567	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



Figura 17 Tabella Integrated Peaks con i valori di idoneità del sistema

5 Ripristinare le impostazioni del metodo predefinito, quindi chiudere la finestra Method Editor e Integration Peak List.	<ol style="list-style-type: none">Per annullare le modifiche e ripristinare i valori del metodo predefinito, fare clic sull'icona Restore to last saved values from file  nella barra degli strumenti Method Editor.Chiudere la finestra Method Editor.Selezionare con il tasto destro il titolo della finestra Peak List e fare clic su Floating.Selezionare View > Integration Peak List.	<ul style="list-style-type: none">Dopo aver selezionato il comando Floating dal menu di scelta rapida una seconda volta, la finestra Integration Peak List viene ancorata nella sua posizione iniziale.
---	--	---

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

In questa attività viene estratto uno spettro da un punto specifico del cromatogramma. Il programma Qualitative Analysis estrae uno spettro da un punto dati specifico o estrae uno spettro medio da un media di più punti dati o intervalli.

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Scorrere un cromatogramma per visualizzare lo ione precursore e lo ione prodotto degli ultimi picchi di Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ingrandire la regione tra 13 e 16 minuti. • Utilizzare l'icona Walk Chromatogram. • Rivedere gli spettri partendo da ca. 13 minuti e spostare la freccia verso destra. 	<p>a Selezionare il file di dati Pest - 200 - MRM.D nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Chiudere la finestra Method Editor.</p> <p>c Chiudere la finestra MS Spectrum Results.</p> <p>d Selezionare il cromatogramma TIC MRM nella finestra Data Navigator.</p> <p>e Fare clic sull'icona Autoscale Y-axis during Zoom  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p> <p>f Selezionare 1 come numero massimo di riquadri elenco.</p> <p>g Per ingrandire alcuni picchi, fare clic con il tasto destro del mouse sopra il picco a 13 minuti e trascinarlo a 16, quindi rilasciare.</p> <p>h Fare clic sull'icona Walk Chromatogram  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p> <p>i Spostare il cursore Walk Chromatogram sopra l'asse delle X a 13 minuti, e fare clic.</p> <p>j Per passare da spettro a spettro, utilizzare i tasti freccia SINISTRA e freccia DESTRA sulla tastiera.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Lo strumento Walk Chromatogram è particolarmente utile con i dati MS/MS per identificare gli ioni precursore e prodotto. • Lo spettro selezionato in ciascun punto della finestra Chromatogram Results viene automaticamente visualizzato nella finestra Spectrum Preview, che si apre da sé. • Talvolta vengono visualizzati nella finestra Spectrum Preview due spettri. Ad esempio, nella finestra Spectrum Preview vengono visualizzati due spettri per ciascun punto selezionato vicino al picco a 13,431 minuti.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

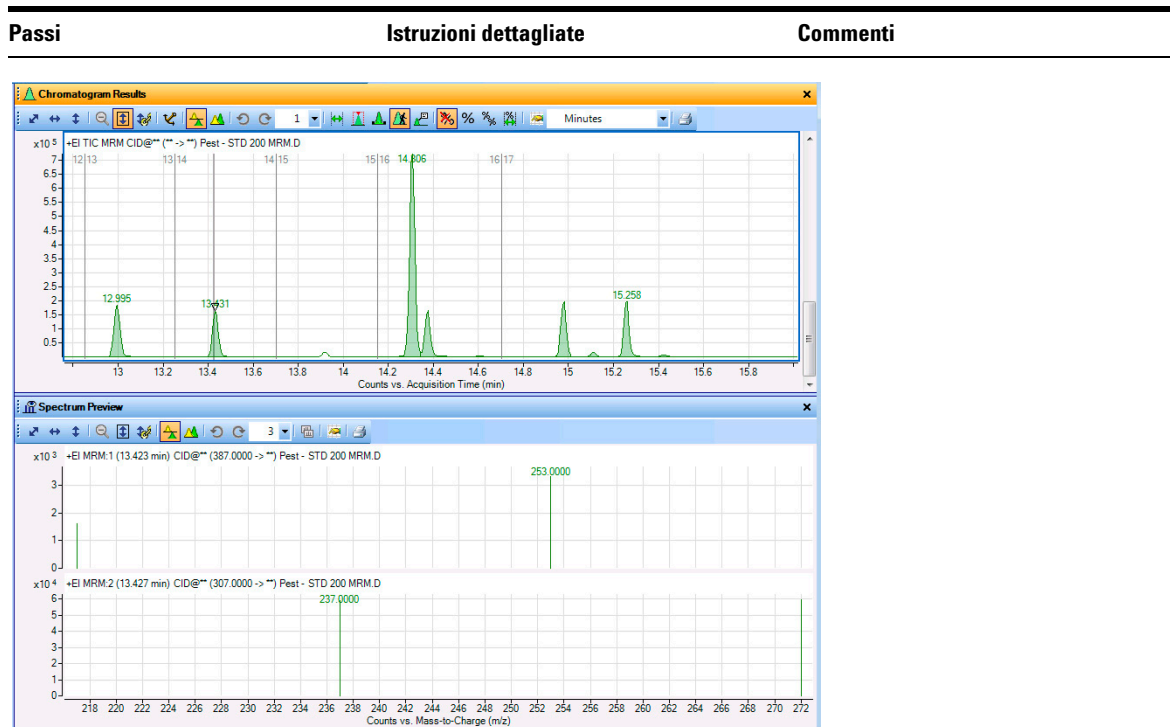






Figura 18 Utilizzo di Walk chromatogram per visualizzare due spettri MRM per il picco a 13,43 minuti

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>2 Estrarre gli spettri su punti dati specifici per il picco a 5,2 minuti e il picco a 14,3 minuti del file di dati Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> Estrarre uno spettro dal picco a o in prossimità di 5,2 minuti e uno a valle, utilizzando una delle opzioni descritte in Commenti. Estrarre uno spettro dal picco a o in prossimità di 14,3 minuti (non ancora a valle). Modificare la visualizzazione per rappresentare gli ultimi tre spettri. 	<p>a Fare clic sull'icona Range Select  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p> <p>b Chiudere la finestra Spectrum Preview.</p> <p>c Fare clic sull'icona Zoom Out  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p> <p>d Per ingrandire il picco a 5,2 minuti, fare clic con il tasto destro del mouse sopra il picco a 4,0 minuti e trascinarlo fino a 6,0 minuti, quindi rilasciare.</p> <p>e Su un picco in prossimità di 5,2 minuti, estrarre uno spettro in uno dei modi elencati nella colonna Commenti.</p> <p>f A valle in prossimità di 5,1 minuti, estrarre lo spettro.</p> <p>g Fare clic sull'icona Zoom Out  nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p> <p>h Ingrandire la regione tra 14 e 15 minuti.</p> <p>i Su un picco in prossimità di 14,3 minuti, estrarre uno spettro in uno dei modi elencati nella colonna Commenti (non estrarre ancora lo spettro a valle).</p> <p>j Se necessario, selezionare 4 in Maximum number of list panes nella barra degli strumenti MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Durante lo zoom, assicurarsi che l'opzione AutoScale Y-axis  sia "attiva". Se è attiva, lo sfondo dell'icona diventa arancione. I cromatogrammi possono essere estratti in uno dei seguenti modi: <ul style="list-style-type: none"> Fare doppio clic sul punto dati del cromatogramma. Fare doppio clic sul punto dati del cromatogramma, quindi fare clic con il tasto destro in un punto qualsiasi del cromatogramma. Selezionare Extract MS Spectrum. Verrà visualizzata la finestra di dialogo Extract Spectrum. Verificare che sia selezionato il file Pest - STD 200 MRM.d, quindi fare clic su Extract nella finestra di dialogo Extract Spectrum. Nota: quando si estrae uno spettro, nella finestra MS Spectrum Results viene visualizzato lo spettro. Il tipo dello spettro e il tempo di ritenzione compaiono alla voce User Spectra. Tutti gli spettri estratti successivamente vengono visualizzati negli stessi punti. Quando si estrae uno spettro MS dal picco in prossimità di 14,3 minuti, vengono estratti due spettri, poiché su quel picco hanno luogo due transizioni.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi

Istruzioni dettagliate

Commenti

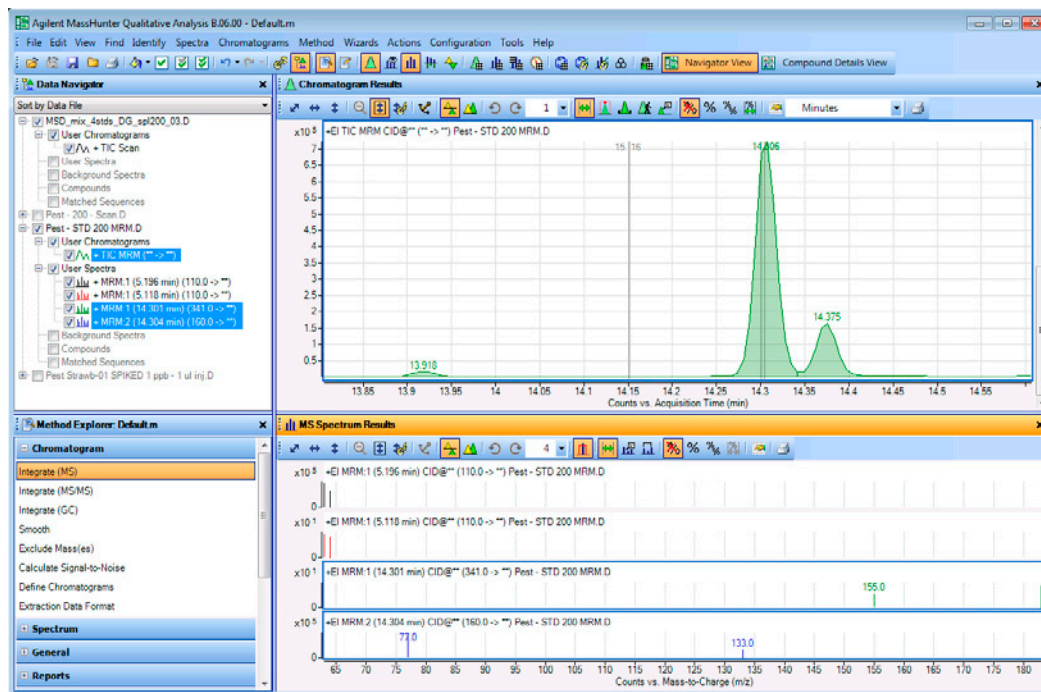


Figura 19 Finestra principale con i due spettri MRM dal picco a 5,2 minuti e i due spettri MRM dal picco a 14,3 minuti

3 Estrarre uno spettro MS dalla valle a 14,35 minuti del file di dati **Pest - STD 200 MRM.d**.

- Attivare Spectrum Preview.
- Estrarre uno spettro dalla valle a 14,3 minuti di RT.
- Copiare questo spettro nella cartella User Spectra.
- Modificare la visualizzazione per rappresentare 6 spettri.
- Disattivare Spectrum Preview.

a Selezionare l'icona **Spectrum Preview** .

b A valle in prossimità di 14,3 minuti, estrarre uno spettro.

c Selezionare con il tasto destro del mouse lo spettro nella finestra Spectrum Preview, quindi fare clic su **Copy to User Spectra**. Gli spettri vengono copiati nella sezione User Spectra in Data Navigator e visualizzati nella finestra MS Spectrum Results.

d Selezionare la freccia in giù vicino al riquadro degli spettri, e selezionare **6**.

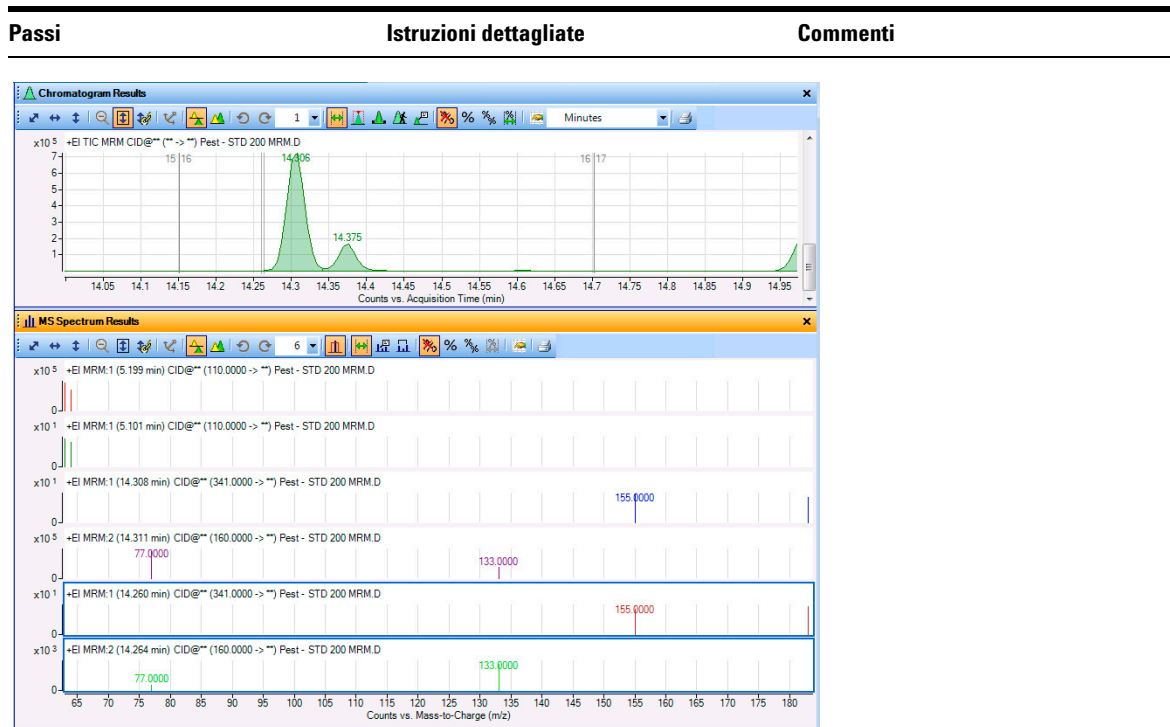
e Chiudere la finestra Spectrum Preview.

- Se la finestra Spectrum Preview è attiva, il sistema visualizza tutti gli spettri selezionati manualmente nella finestra Spectrum Preview e non nella sezione User Spectra di Data Navigator.

- Con Spectrum Preview attivata, il programma Qualitative Analysis sovrascrive lo spettro precedente dopo aver estratto quello nuovo.

- La modalità Spectrum Preview è utile per rivedere velocemente gli spettri nel cromatogramma e salvarne solo alcuni.

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma



1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

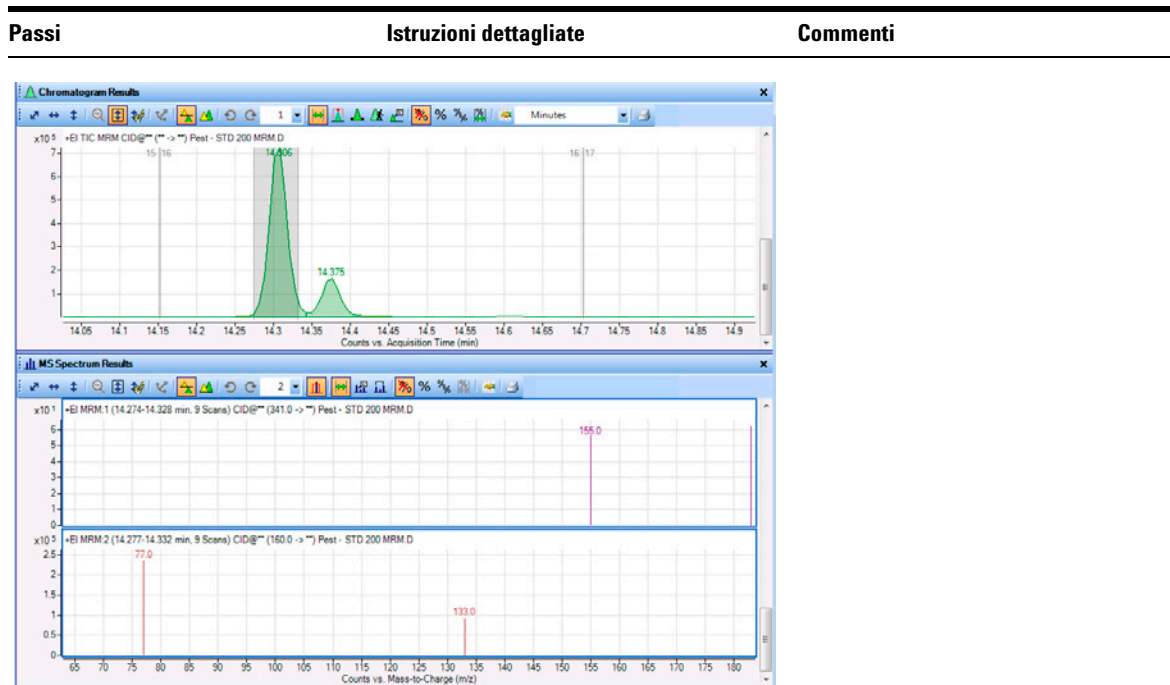
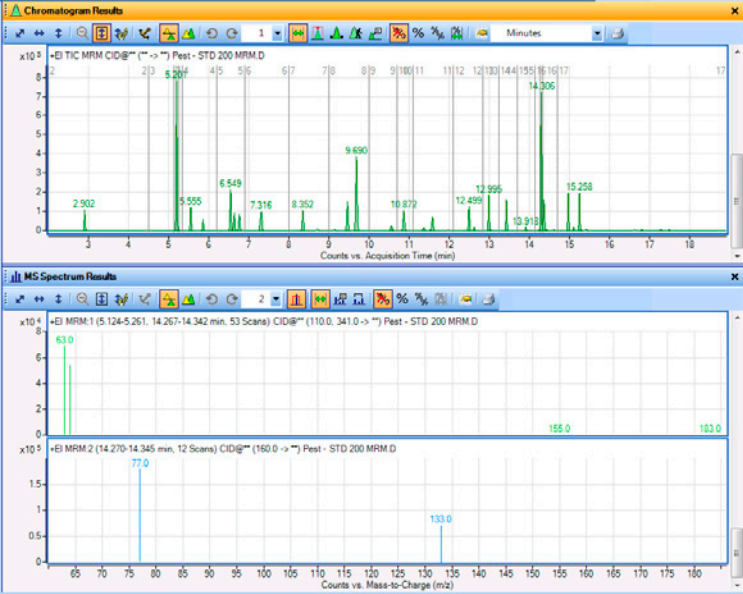


Figura 21 Finestre Chromatogram Results e MS Spectrum Results con due spettri medi

- 5** Estrarre gli spettri con media degli intervalli dei picchi a 5,2 minuti e 14,3 minuti per il file di dati **Pest - STD 200 MRM.d**.
- Suggerimento: utilizzare l'icona Range Select e il tasto **Ctrl** per selezionare l'intervallo del Picco 1 rilevato dal punto a metà.
 - Estrarre lo spettro utilizzando una delle opzioni a destra.
- a** Fare clic sull'icona **Zoom Out** nella barra degli strumenti Chromatogram Results.
- b** Premere il tasto **Ctrl**.
- c** Fare clic sul lato sinistro della base del picco a 5,2 minuti e trascinare verso la destra del picco, quindi rilasciare il mouse.
- d** Rilasciare il tasto **Ctrl**.
- e** Estrarre gli spettri medi utilizzando questa opzione o una a destra:
- Fare doppio clic all'interno dell'intervallo selezionato in uno dei due picchi.
- Ricordare che per il secondo picco è già stato selezionato un intervallo nel Passo 4.
 - Per estrarre uno spettro, è possibile anche fare clic con il tasto destro in un punto qualsiasi del cromatogramma e selezionare **Extract MS Spectrum**. Si apre la finestra di dialogo Extract Spectrum. Selezionare **Extract**.


Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
	<p>Il primo spettro presenta transizioni dai due intervalli temporali. Il secondo spettro ha solo un intervallo temporale poiché la transizione 160.00 -> ** non esiste nel picco a 5,2 minuti.</p>	
<p>Figura 22 Due spettri medi da due diversi intervalli nel cromatogramma</p>		

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>6 Sottrarre uno spettro di fondo ogni qual volta si estrae uno spettro del picco di Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Eliminare tutte le scansioni alla voce User Spectra in Data Navigator.• Estrarre uno spettro di fondo che sia la media di uno spettro all'inizio del picco e uno spettro alla fine del picco.• Estrarre uno spettro del picco dai picchi integrati.	<p>a Fare clic sulla riga User Spectra in Data Navigator. Fare clic con il tasto destro sulla riga User Spectra, e selezionare Delete.</p> <p>b Fare clic su Yes.</p> <p>c In Method Explorer, selezionare Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>d Fare clic sulla scheda Peak Spectrum Extraction (MS/MS), se non è visibile.</p> <p>e Nella finestra Peak spectrum background MS/MS, selezionare Average of spectra at peak start and end.</p> <p>f Nella barra degli strumenti Chromatogram Results, selezionare l'icona Peak Select .</p> <p>g Selezionare il comando Chromatograms > Integrate.</p> <p>h Selezionare il picco a 5,206 minuti.</p> <p>i Fare clic con il tasto destro e selezionare Extract Peak Spectrum dal menu di scelta rapida.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Alla fine del processo, a tutti gli spettri del picco estratti viene automaticamente sottratto il rispettivo spettro di fondo.

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------

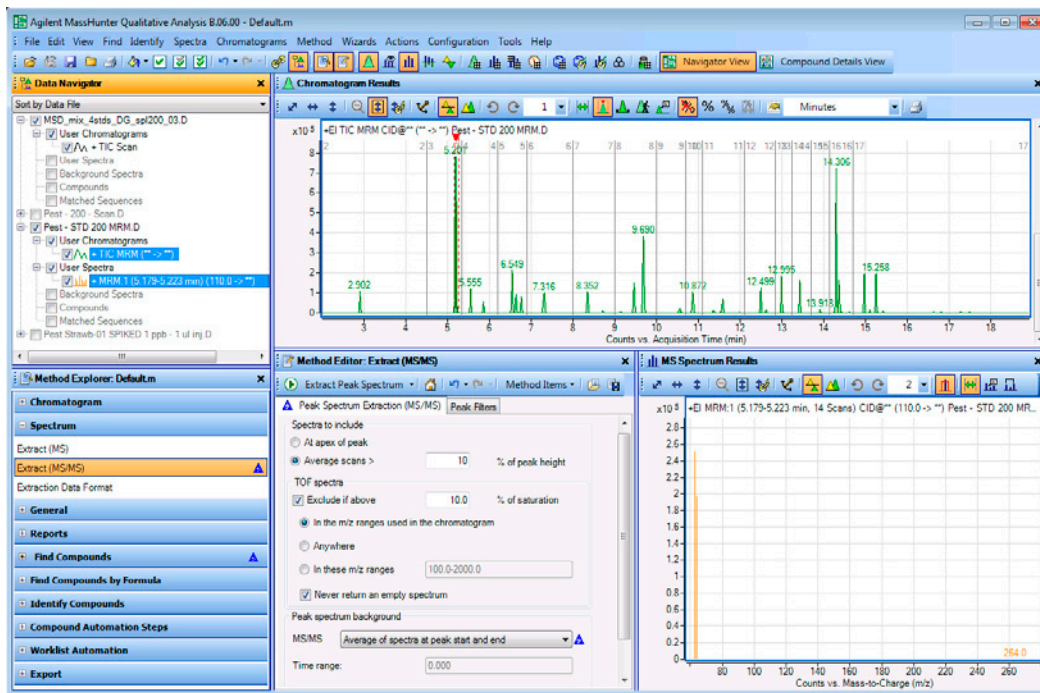


Figura 23 Spettri del picco con spettro di fondo sottratto

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Attività 9. Estrarre gli spettri da un cromatogramma

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
7	Integrare ed estrarre gli spettri del picco dal file di dati Pest - STD 200 MRM.d. a Selezionare il cromatogramma TIC MRM nella finestra Data Navigator. b Selezionare Chromatograms > Integrate e Extract Peak Spectra.	<ul style="list-style-type: none">• Gli spettri del picco estratti manualmente nel passo precedente vengono eliminati automaticamente. Per impostazione predefinita, difatti, la casella di controllo Clear previous peak spectra è selezionata nella scheda Chromatograms > Integrate (MS/MS) > Results.

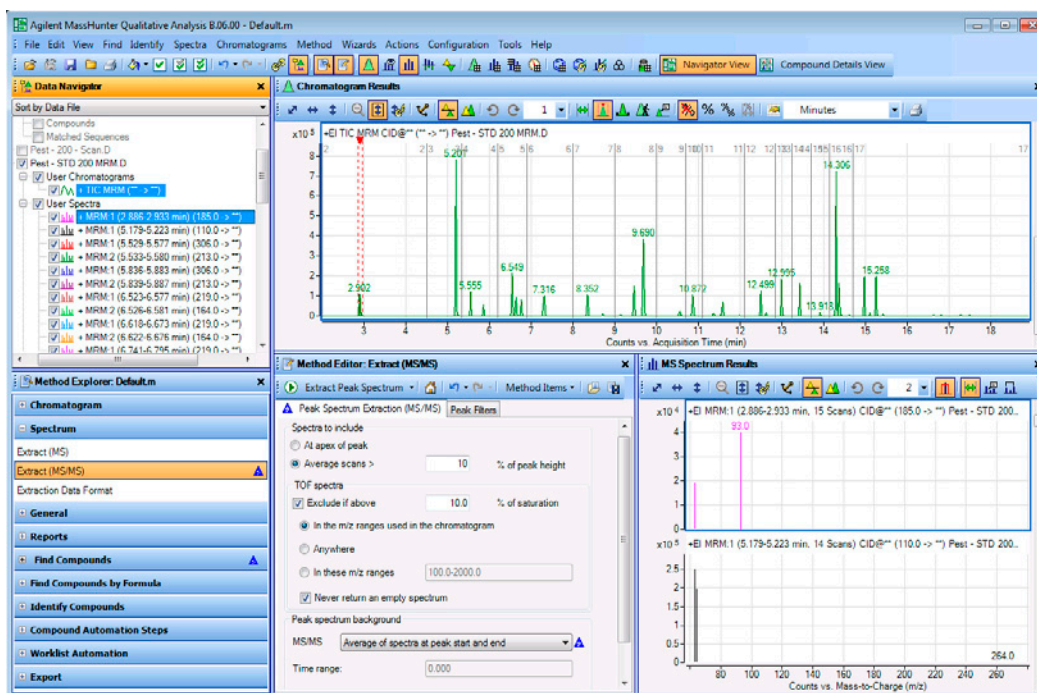


Figura 24 Integrazione ed estrazione degli spettri del picco

8	Rimuovere i risultati dell'integrazione e gli spettri del picco. a Selezionare il file di dati Pest - Std 200 MRM.d. b Selezionare Chromatograms > Clear Results> Include Peak Spectra.	<ul style="list-style-type: none">• Oppure selezionare Chromatograms > Clear Results > Only Chromatograms se non si intende eliminare gli spettri del picco.
---	--	---


Attività 10. Aggiungere annotazioni

Alle seguenti finestre grafiche è possibile aggiungere un'immagine o un testo:

- Finestra Chromatogram Results
- Finestra MS Spectrum Results

Le annotazioni vengono salvate insieme ai risultati del file di dati.

Attività 10. Aggiungere annotazioni

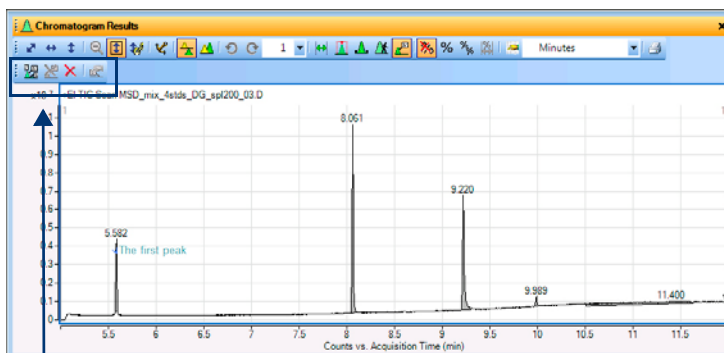
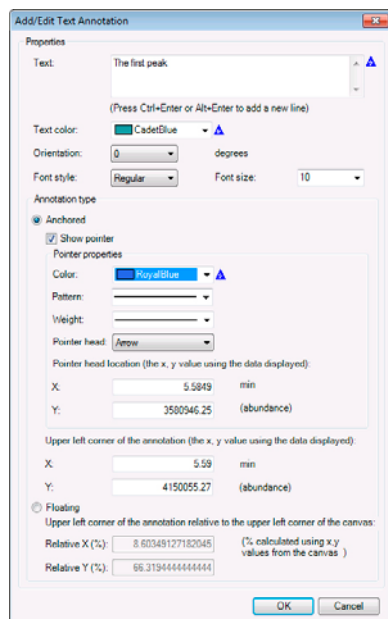
Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Nascondere gli altri cromatogrammi.	<p>a Contrassegnare la casella di controllo a fianco di MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Selezionare Edit > Show > Only Highlighted.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • I cromatogrammi degli altri file di dati vengono automaticamente nascosti.
2 Scegliere il punto in cui aggiungere un testo all'interno del cromatogramma.	<p>a Nella finestra Chromatogram Results, selezionare lo strumento Annotation () nella barra degli strumenti.</p> <p>b Spostare il cursore nel punto del riquadro del cromatogramma in cui si vuole aggiungere l'annotazione.</p> <p>c Con il tasto destro del mouse selezionare Add Text Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Il cursore si trasforma in un mirino. Utilizzare il cursore per selezionare il punto esatto in cui aggiungere l'annotazione. • Nella finestra Chromatogram Results, è disponibile la barra degli strumenti Annotate. • È possibile aggiungere delle annotazioni anche alla finestra MS Spectrum Results.
3 Aggiungere il testo dell'annotazione della finestra di dialogo Add/Edit Text Annotation	<p>a Digitare Text per l'annotazione.</p> <p>b Selezionare Text color.</p> <p>c Selezionare Orientation.</p> <p>d Selezionare Font style e Font size.</p> <p>e Fare clic su Anchored o Floating. Se si sceglie Anchored, selezionare le opzioni del puntatore del testo. Se si seleziona Floating, è possibile modificare la posizione. È più semplice modificare la posizione in modo interattivo all'interno della finestra grafica.</p> <p>f Fare clic su OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • È possibile aggiungere ad un cromatogramma o uno spettro più di un'annotazione. • Utilizzare le icone nella barra degli strumenti Annotate per selezionare tutte le annotazioni, eliminarle o modificarle.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 10. Aggiungere annotazioni

Attività 10. Aggiungere annotazioni (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------



La barra degli strumenti Annotate è disponibile solo se è selezionato lo strumento Annotate.

Figura 25 Finestra di dialogo Add/Edit Text Annotation e finestra Chromatogram Results

- 4 Scegliere il punto in cui aggiungere un'immagine all'interno del cromatogramma.
 - a Spostare il cursore nel punto del riquadro del cromatogramma in cui si vuole aggiungere l'annotazione.
 - b Con il tasto destro del mouse selezionare **Add Image Annotation**.
- È possibile aggiungere un file immagine nel formato JPG o MOL.

Attività 10. Aggiungere annotazioni (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
5	<p>Aggiungere il testo dell'annotazione della finestra di dialogo Add/Edit Text Annotation</p> <p>a Digitare Text per l'annotazione. b Nel campo Scale width digitare 50. c Contrassegnare la casella Lock aspect ratio. d Fare clic su Floating. La posizione dell'immagine può essere modificata. È più semplice modificare la posizione in modo interattivo all'interno della finestra grafica. e Fare clic su OK. f Spostare l'immagine più in alto, nell'angolo destro del cromatogramma.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Il file Agilent_Logo.tif si trova nella cartella \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter. È necessario per convertire in un file JPG. È possibile aggiungere ad un cromatogramma o uno spettro più di un'annotazione.

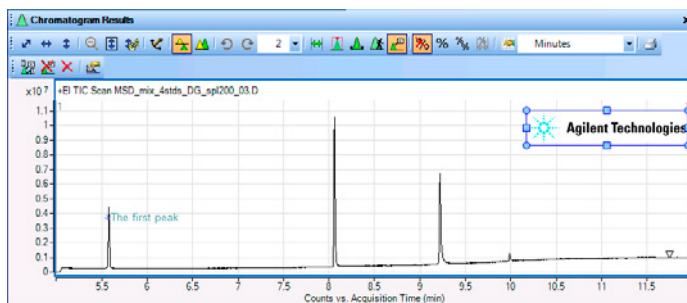
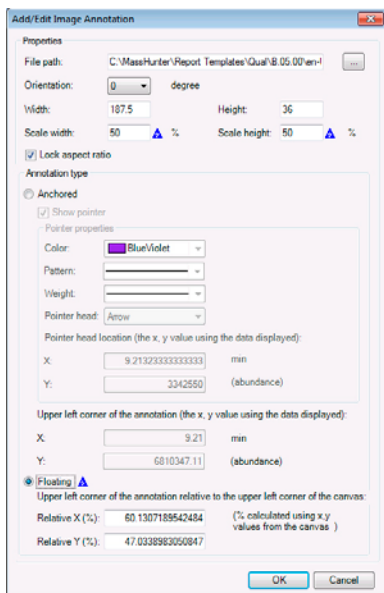


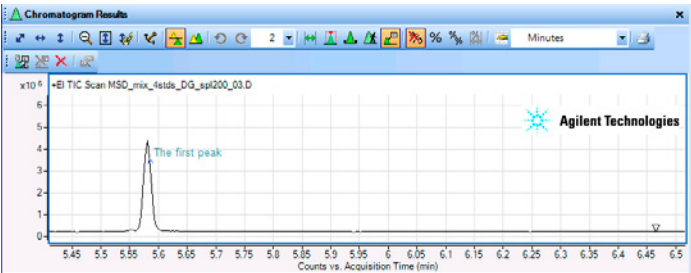


Figura 26 Finestra di dialogo Add/Edit Image Annotation e finestra Chromatogram Results

- 6 Ingrandire il primo picco.
- Ingrandire l'area che circonda il primo picco a 5,5 minuti.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 10. Aggiungere annotazioni

Attività 10. Aggiungere annotazioni (segue)


Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
		<p>Se un'annotazione è ancorata, rimane nella posizione in cui è stata ancorata. Se si ingrandisce un altro picco, l'annotazione ancorata potrebbe non essere visibile. Se un'annotazione è mobile, viene sempre visualizzata nella stessa posizione, nell'angolo in alto a sinistra della finestra.</p>
7 Tornare allo strumento Range Select nella finestra Chromatogram Results. Innanzitutto eliminare l'annotazione.	<p>a Fare clic sull'icona  per rimuovere tutte le annotazioni.</p> <p>b Fare clic sull'icona  (Range Select) nella barra degli strumenti Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Per salvare le annotazioni insieme ai risultati dei file di dati, vedere “Attività 17. Salvare i risultati” a pagina 64.• È possibile scegliere tra cinque diversi strumenti nella barra degli strumenti Chromatogram Results. Consultare la Guida in linea per ulteriori informazioni. I cinque strumenti disponibili sono:<ul style="list-style-type: none">• Range Select• Peak Select• Manual Integration• Walk Chromatogram• Annotation Mouse

Attività 11. Aggiungere un calibro della massa

Un calibro misura la differenza tra due punti in uno spettro. È possibile aggiungere un calibro alla finestra MS Spectrum Results.

I calibri vengono salvati insieme ai risultati del file di dati.

Attività 11. Aggiungere un calibro della massa

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Integrare ed estrarre lo spettro del picco da MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<p>a Contrassegnare la casella di controllo a fianco di MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Selezionare Edit > Show > Only Highlighted.</p> <p>c Selezionare Chromatograms > Integrate e Extract Peak Spectra.</p> <p>d Chiudere la finestra Method Editor.</p>	
2 Aggiungere il calibro allo spettro del picco creato nell'attività precedente.	<p>a Nella finestra MS Spectrum Results, selezionare lo strumento Delta Mass Caliper () nella barra degli strumenti.</p> <p>b (opzionale) Selezionare Profile Point to Point per scegliere il tipo di calibro nella barra degli strumenti Caliper.</p> <p>c Ingrandire tra 66 e 132 <i>m/z</i>.</p> <p>d Spostare il cursore nel punto del riquadro dello spettro in cui si vuole aggiungere il calibro.</p> <p>e Spostare il cursore alla fine del calibro all'interno dello spettro. Man mano che si trascina il cursore, il valore della massa del delta cambia. Il calibro viene aggiunto nel momento in cui si rilascia il mouse.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Il cursore si trasforma in una freccia. Utilizzare questo cursore per selezionare il punto di inizio e di fine del calibro. • Non è possibile selezionarlo e il tipo di calibro se lo spettro si trova nel baricentro, poiché l'opzione Profile Point to Point non avrebbe effetto su questo tipo di dati. • Il cursore a forma di "triangolo" compare sul punto più alto del picco selezionato.

1 Concetti base di analisi qualitativa

Attività 11. Aggiungere un calibro della massa

Attività 11. Aggiungere un calibro della massa (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
3 Modificare il calibro per utilizzare un colore diverso.	<ol style="list-style-type: none">Selezionare il calibro creato nel passo precedente.Fare clic sul pulsante Caliper Properties () nella barra degli strumenti MS Spectrum Results Caliper.(opzionale) Digitare i valori Start X e Start Y.Selezionare Text color.Selezionare Font style e Font size.Fare clic su OK.	<ul style="list-style-type: none">Ad uno spettro è possibile aggiungere più di un calibro.Utilizzare le icone nella barra degli strumenti Caliper per selezionare tutti i calibri, eliminarli o modificarli.

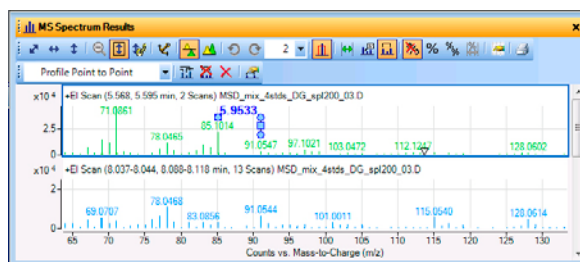
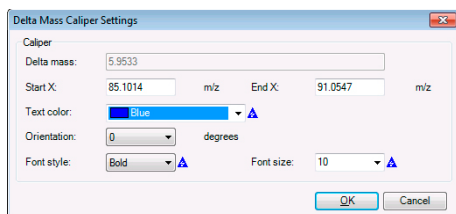
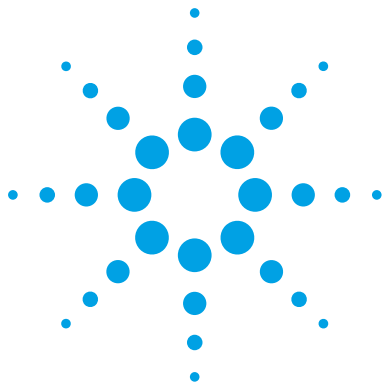


Figura 28 Finestra di dialogo Delta Mass Caliper Settings e finestra MS Spectrum Results window

4 Eliminare i risultati dell'integrazione e gli spettri.	<ol style="list-style-type: none">Selezionare Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.Fare clic sullo strumento Range Select.	<ul style="list-style-type: none">Per salvare i calibri insieme ai risultati dei file di dati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64.
--	---	---



2 Ricerca e identificazione

Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica	46
Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library	50
Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)	53
Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione	56
Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco	59
Attività 17. Salvare i risultati	64

In queste attività, vengono ricercati e identificati i composti nel file di dati GC/MS.

Ciascun esercizio è riassunto in una tabella di tre colonne:

- Passi – Seguire tali istruzioni generali per procedere da soli e scoprire il programma.
- Istruzioni dettagliate – Seguire queste istruzioni in caso di dubbio o se si preferisce procedere gradatamente alla conoscenza del programma.
- Commenti – Consigli e informazioni aggiuntive su ciascun passo dell'esercitazione.



Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica

L'algoritmo FindCompounds identifica i composti nei dati GC/MS e crea uno spettro MS pulito per ciascun composto. Si tratta di un modo semplice per scavare a fondo nei dati complessi. È possibile utilizzare solo l'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution su dati campione GC/MS acquisiti con la modalità di scansione Scan, Product Ion scan o Neutral Loss.

Questa attività mostra come cercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica con dati di massa precisi. È inoltre possibile cercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica con dati di massa unitari dopo aver modificato la finestra di estrazione.

Attività 12. Ricercare i composti mediante Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona MassHunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC.</p> <p>c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> L'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution funziona sia con i file di dati GC/QQQ che GC/Q-TOF.

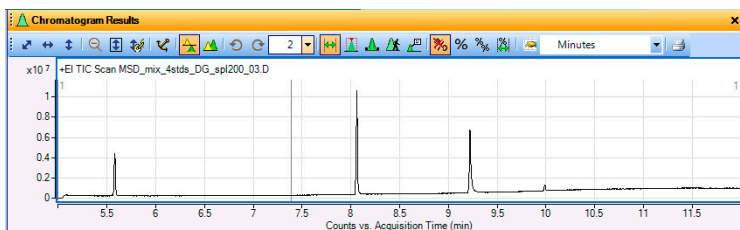


Figura 29 Cromatogramma TIC da Pest - 200 - Scan.d

2 Configurare l'interfaccia utente per utilizzare i dati GC.	<ul style="list-style-type: none"> Seguire le istruzioni in "Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS" a pagina 12. 	<ul style="list-style-type: none"> Per questi esempi, caricare il workflow GC/Q-TOF Compound Screening.
--	---	--

Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica

Attività 12. Ricercare i composti mediante Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti	
3	<p>Ricercare i composti utilizzando l'algoritmo di deconvoluzione cromatografica.</p> <ul style="list-style-type: none"> Selezionare l'integratore Agile. Inserire una soglia SNR di 20. Inserire 100 ppm in Left m/z delta e Right m/z delta. 	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Find Compounds > Find by Chromatogram Deconvolution.</p> <p>b Nella scheda Settings, alla voce Peak, digitare 20 come SNR threshold.</p> <p>c Selezionare PPM come m/z delta units.</p> <p>d Inserire 100 come Left m/z delta, 100 come Right m/z delta.</p>	<ul style="list-style-type: none"> La sezione Find by Chromatogram Deconvolution è disponibile anche nella sezione GC/Q-TOF Compound Screening. In caso di dati di massa unitari, inserire 0,3 AMU come Left m/z delta e 0,7 AMU come Right m/z delta. È possibile estrarre tutti i risultati completi di un composto trovato selezionando le voci di menu Compounds > Extract Complete Result Set dopo aver evidenziato il composto.

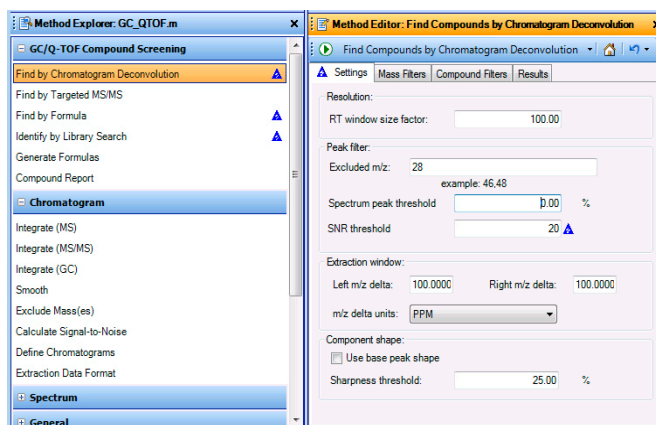



Figura 30 Scheda Settings nella sezione Find by Chromatogram Deconvolution

2 Ricerca e identificazione

Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica

Attività 12. Ricercare i composti mediante Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
<ul style="list-style-type: none">Selezionare per estrarre gli spettri EIC, MS e MS/MS.	<p>e Selezionare la scheda Results.</p> <p>f Selezionare le caselle di controllo Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum e Extract raw spectrum.</p> <p>g Fare clic su  per eseguire l'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution sul file di dati.</p> <p>h Se necessario, selezionare il comando View > Compound List.</p>	<ul style="list-style-type: none">Con queste condizioni, il programma Qualitative Analysis trova 4 composti.Se il file di dati non è indicizzato, l'esecuzione dell'algoritmo potrebbe essere lunga.
<p>4 Esaminare i composti. Vedere Figura 31 a pagina 49.</p>	<p>a Selezionare 2 nella casella Maximum number of list panes della barra degli strumenti MS Spectrum Results.</p> <p>b Fare clic sull'icona Hide Empty Columns nella finestra Compound List.</p> <p>c Selezionare il primo composto nella finestra Data Navigator.</p> <p>d Se la finestra Data Navigator è selezionata, utilizzare i tasti freccia per passare da un composto all'altro.</p>	<ul style="list-style-type: none">È utile visualizzare entrambi gli spettri perché in questo modo è possibile accedere a tutte le informazioni sul singolo composto.Notare che vengono visualizzati sia lo spettro pulito che quello grezzo.

Attività 12. Ricercare i composti mediante Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Passaggio

Istruzioni dettagliate

Commenti

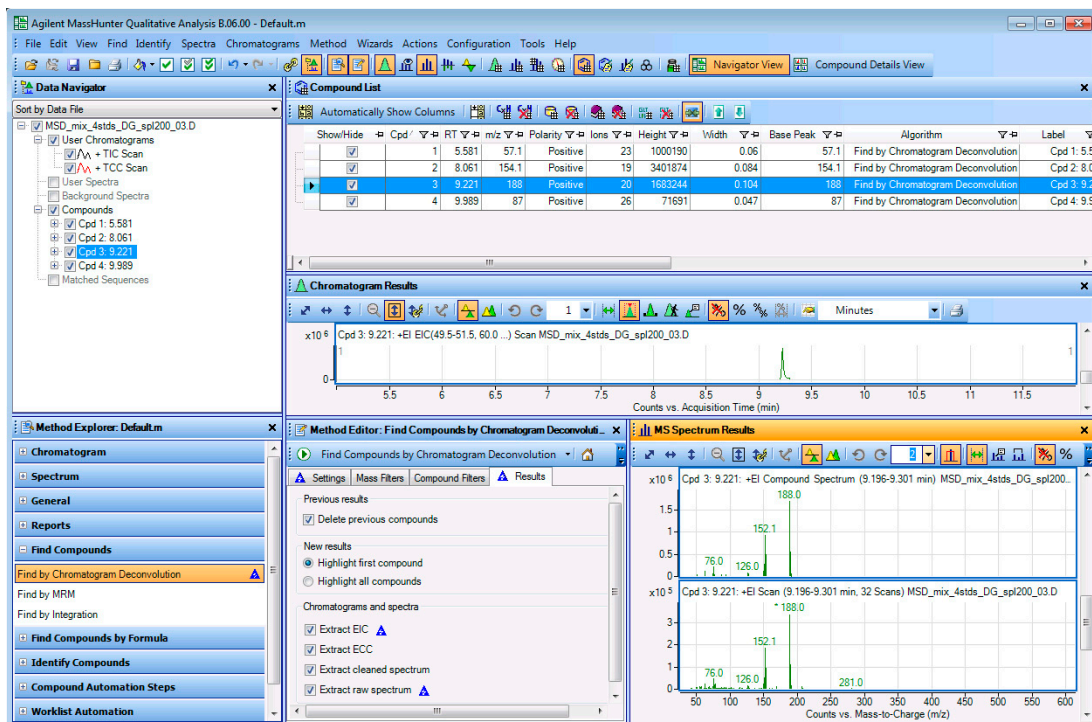



Figura 31 Risultati di Find Compounds by Chromatogram Deconvolution



Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library

In questa attività si identificano e generano le formule per i composti trovati in “Attività 12. Ricercare i composti mediante deconvoluzione cromatografica” a pagina 46. È possibile eseguire questa attività se è stata acquistata la libreria *NIST08.l* o se si utilizza la libreria *demo.l*. Se si possiedono le due librerie, è possibile selezionarle entrambe.

Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1	<p>Utilizzare una libreria per ricercare tutti i composti nel file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Evidenziare i composti del file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D nella finestra Data Navigator.</p> <p>b Nella finestra Method Explorer, selezionare Identify Compounds > Search Unit Mass Library.</p> <p>c Nella scheda Settings, fare clic sul pulsante Add Library. Selezionare la libreria demo.l e fare clic sul pulsante OK.</p> <p>d (opzionale) Nella scheda Settings, fare clic sul pulsante Add Library. Selezionare la libreria NIST08.l e fare clic sul pulsante OK.</p> <p>e Selezionare la scheda Search Results.</p> <p>f (opzionale) Selezionare Stop When Found per Multi-Library search type.</p> <p>g Fare clic su Identify > Search Library for Compounds dal menu principale. Oppure, selezionare l'icona Search Library for Compounds icon  per eseguire l'algoritmo.</p> <p>h Selezionare View > Difference Results.</p> <p>i Selezionare View > Structure Viewer.</p> <p>j Selezionare View > Compound Identification Results se necessario, per visualizzare la finestra.</p> <p>k Se necessario, selezionare la scheda per la finestra Compound Identification Results. Questa finestra è una scheda della finestra Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> È possibile anche fare clic su GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search in Method Explorer. Si apre la stessa sezione della finestra Method Editor. Le librerie Demo.l e Nist08 devono essere installate nella cartella \ MassHunter\Library. Molti dei composti vengono identificati eseguendo la ricerca con la libreria <i>NIST08.l</i>. Se non si dispone della libreria <i>NIST08.l</i>, selezionarne un'altra se disponibile. Se sono state scelte due o più librerie e si seleziona Stop When Found, l'algoritmo di ricerca esegue la ricerca nella prima libreria dell'elenco. Se il composto viene identificato, la ricerca si arresta. Se il composto non viene identificato, la ricerca prosegue nella libreria successiva fino all'identificazione del composto e termina nell'ultima libreria. Utilizzare il programma Library Editor per modificare le librerie che si utilizzano con l'algoritmo Search Unit Mass Library. Questo programma viene installato insieme al programma Agilent MassHunter Quantitative Analysis. Fare clic sull'icona  per avviare il programma.

Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
2	<p>Visualizzare le colonne Spectral Library Results nella finestra Compound List e nella finestra Compound Identification Results.</p> <p>a Fare clic sul pulsante Show Library Search Columns () nella barra degli strumenti Compound List e nella barra degli strumenti Compound Identification Results.</p> <p>b Fare clic sul pulsante Hide Empty Columns () nella barra degli strumenti Compound List e nella finestra Compound Identification Results.</p>	

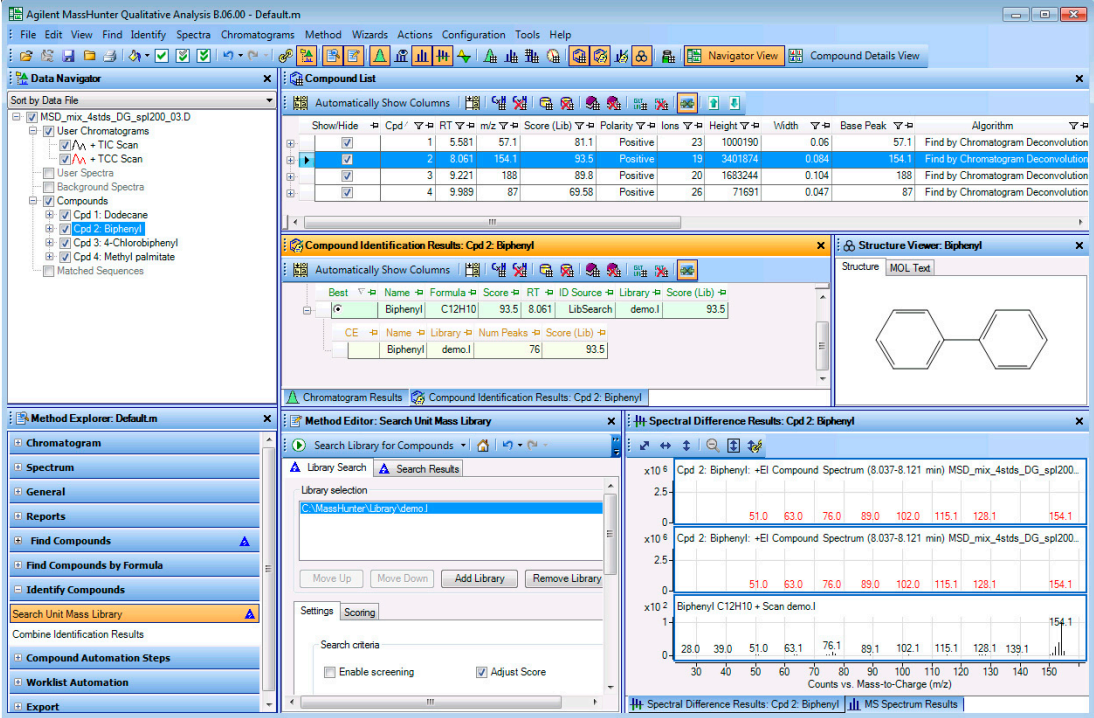


Figure 32 Composti nel file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D e risultati della ricerca nella libreria


Best	Name	Formula	Score	RT	ID Source	Library	Score (Lib)
	Biphenyl	C12H10	93.5	8.061	LibSearch	demo.1	93.5

CE	Name	Library	Num Peaks	Score (Lib)
	Biphenyl	demo.1	76	93.5

Spectrum	Mass-to-Charge (m/z)	Relative Intensity
Cpd 2: Biphenyl +EI Compound Spectrum (8.037-8.121 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200...	51.0	0.1
	63.0	0.1
	76.0	0.2
	89.0	0.1
	102.0	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	154.1	0.2
Cpd 2: Biphenyl +EI Compound Spectrum (8.037-8.121 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200...	51.0	0.1
	63.0	0.1
	76.0	0.2
	89.0	0.1
	102.1	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	154.1	0.2
Biphenyl C12H10 + Scan demo.1	28.0	0.05
	39.0	0.05
	51.0	0.1
	63.1	0.1
	76.1	0.2
	89.1	0.1
	102.1	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	139.1	0.05
154.1	0.2	

Spectrum	Mass-to-Charge (m/z)	Relative Intensity
Cpd 2: Biphenyl +EI Compound Spectrum (8.037-8.121 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200...	51.0	0.1
	63.0	0.1
	76.0	0.2
	89.0	0.1
	102.0	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	154.1	0.2
Cpd 2: Biphenyl +EI Compound Spectrum (8.037-8.121 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200...	51.0	0.1
	63.0	0.1
	76.0	0.2
	89.0	0.1
	102.1	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	154.1	0.2
Biphenyl C12H10 + Scan demo.1	28.0	0.05
	39.0	0.05
	51.0	0.1
	63.1	0.1
	76.1	0.2
	89.1	0.1
	102.1	0.1
	115.1	0.1
	128.1	0.1
	139.1	0.05
154.1	0.2	

3 Passare a Compound Details View per rivedere i composti.

a Selezionare  Compound Details View nella barra degli strumenti principale.

b Chiudere la finestra **Compound Fragment Spectrum Results**.

2 Ricerca e identificazione

Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library

Attività 13. Identificare i composti mediante l'algoritmo Search Library

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
4 Rivedere i risultati in Compound Details View.	<p>a Fare clic sull'icona Overlaid nella finestra Compound Chromatogram Results.</p> <p>b Espandere i risultati nella finestra Compound Identification Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">Nella Guida in linea sono disponibili altre informazioni su Compound Details View. Compound Details View è molto utile per rivedere i risultati ottenuti mediante l'algoritmo Find by Formula con un file di dati acquisito in modalità All Ions.

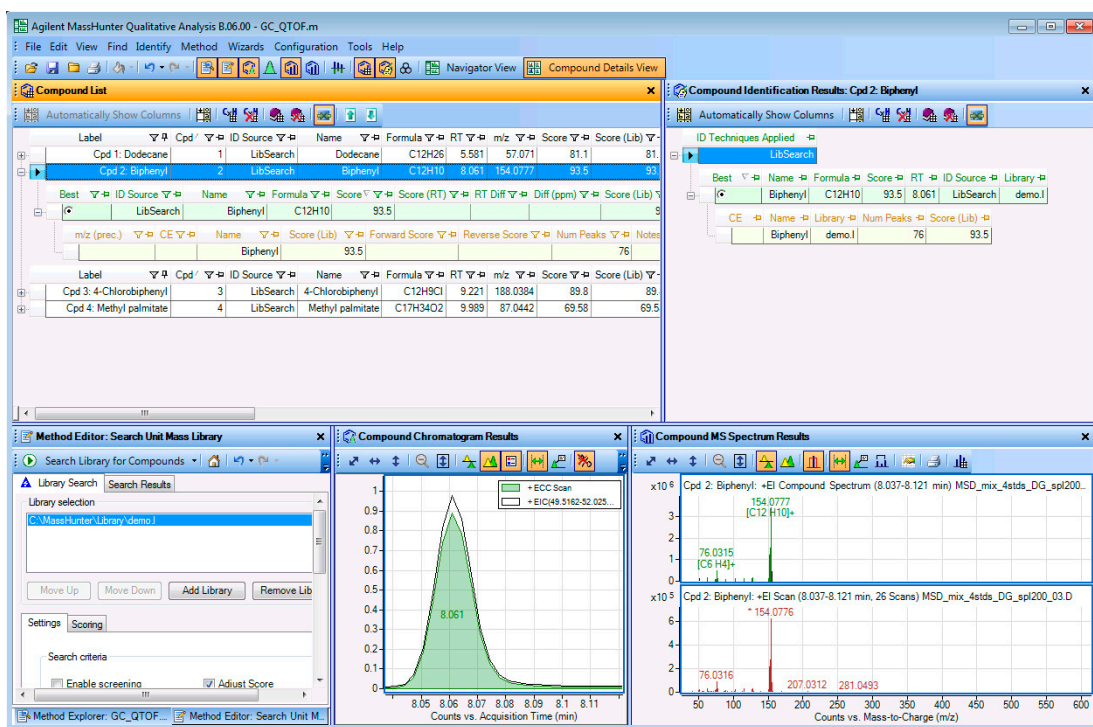



Figura 33 Compound Details View e composti nel file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D

5 Tornare a Navigator View.

- Premere il pulsante  **Compound Details View** nella barra degli strumenti principale.

6 Chiudere il file di dati.

- a Selezionare **File > Close Data File**.
- b Fare clic su **No**.
- Per salvare questi risultati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64.

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

L'algoritmo Find Compounds by MRM identifica i composti nei dati MRM di un triplo quadrupolo. L'algoritmo ricerca i composti utilizzando le transizioni MRM. Tutte i composti nel metodo di acquisizione vengono estratti e visualizzati in Compound List. I composti non vengono eliminati sulla base dei risultati di integrazione del cromatogramma. È possibile utilizzare l'algoritmo Find Compounds by MRM soltanto su dati acquisiti mediante transizioni MRM. L'algoritmo MRM utilizza le informazioni trovate nel file di dati se il file di dati è un file MRM.

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati Pest - STD 200 MRM.d .	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati Pest - STD 200 MRM.d nella cartella di file d'esempio GC.</p> <p>c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Utilizzare il workflow General quando si lavora con dati GC/QQQ. Se si lavora con i dati GC/Q-TOF è invece possibile utilizzare il workflow General o GC/Q-TOF Compound Screening.

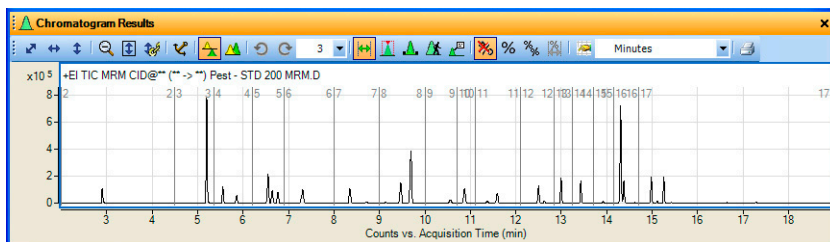


Figura 34 Cromatogramma TIC da Pest - STD 200 MRM.d

- | | |
|--|---|
| 2 Configurare l'interfaccia utente per utilizzare i dati GC. | <ul style="list-style-type: none"> Seguire le istruzioni in "Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS" a pagina 12. |
|--|---|

2 Ricerca e identificazione

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
3	Ricercare i composti utilizzando l'algoritmo MRM.	
	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Find Compounds > Find by MRM.</p> <p>b Premere il pulsante Group transitions by compound name.</p> <p>c Selezionare la scheda Integrator.</p> <p>d Selezionare l'integratore Agile.</p>	<ul style="list-style-type: none">• È possibile scegliere la regione del cromatogramma su cui eseguire la ricerca dei composti.• È possibile estrarre tutti i risultati completi di un composto trovato selezionando le voci di menu Compounds > Extract Complete Result Set dopo aver evidenziato il composto.

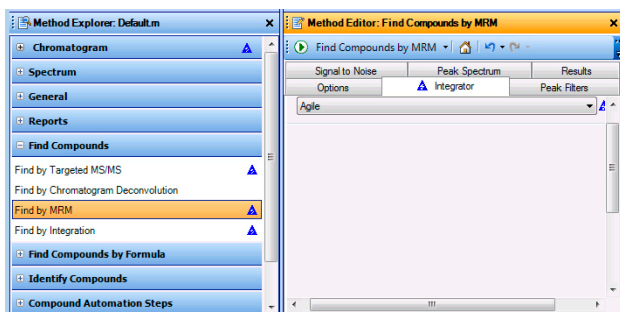



Figura 35 Scheda Integrator nella sezione Find by MRM di Method Editor

	<p>e Fare clic su  per eseguire l'algoritmo Find Compounds by MRM sul file di dati.</p> <p>f Se necessario, selezionare il comando View > Compound List.</p> <p>g Se necessario, selezionare il comando View > Compound Identification Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Con queste condizioni, il programma Qualitative Analysis trova 28 composti.
4	Esaminare i composti. Vedere Figura 36 a pagina 55.	
	<p>a Selezionare 2 nella casella Maximum number of list panes della barra degli strumenti MS Spectrum Results.</p> <p>b Fare clic sull'icona Automatically Show Columns nella finestra Compound List e nella finestra Compound Identification Results.</p> <p>c Selezionare il primo composto nella finestra Data Navigator.</p> <p>d Se la finestra Data Navigator è selezionata, utilizzare i tasti freccia per passare da un composto all'altro.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Lo ione precursore è visualizzato nella colonna Precursor (Acq Method) e lo ione prodotto nella colonna Product (Acq Method) della finestra Compound Identification Results.

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

Attività 14. Ricercare i composti mediante MRM (solo MRM)

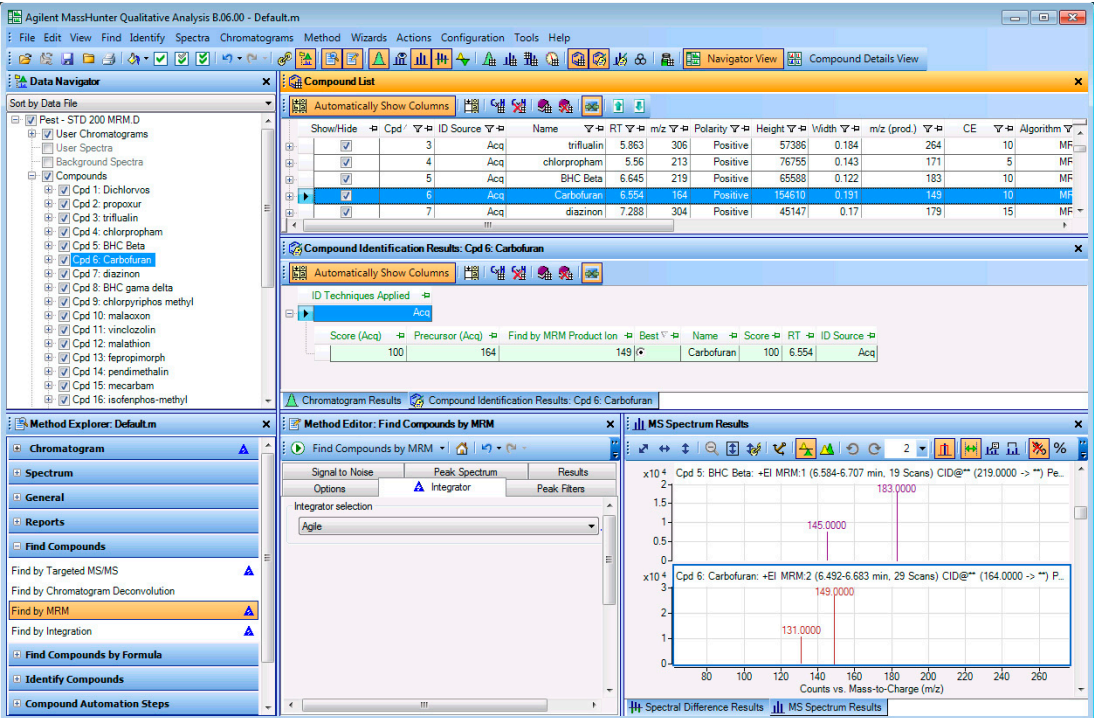
Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti																																																																																								
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 interface. The 'Compound List' window shows the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Show/Hide</th> <th>Cpd</th> <th>ID Source</th> <th>Name</th> <th>RT</th> <th>m/z</th> <th>Polarity</th> <th>Height</th> <th>Width</th> <th>m/z (prod.)</th> <th>CE</th> <th>Algorithm</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>3</td> <td>Acq</td> <td>trifluilin</td> <td>5.863</td> <td>306</td> <td>Positive</td> <td>57306</td> <td>0.184</td> <td>264</td> <td>10</td> <td>MF</td> </tr> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>4</td> <td>Acq</td> <td>chlorpropham</td> <td>5.56</td> <td>213</td> <td>Positive</td> <td>76755</td> <td>0.143</td> <td>171</td> <td>5</td> <td>MF</td> </tr> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>5</td> <td>Acq</td> <td>BHC Beta</td> <td>6.645</td> <td>219</td> <td>Positive</td> <td>65588</td> <td>0.122</td> <td>183</td> <td>10</td> <td>MF</td> </tr> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>6</td> <td>Acq</td> <td>Carbofuran</td> <td>6.554</td> <td>164</td> <td>Positive</td> <td>154610</td> <td>0.191</td> <td>149</td> <td>10</td> <td>MF</td> </tr> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>7</td> <td>Acq</td> <td>diazinon</td> <td>7.288</td> <td>304</td> <td>Positive</td> <td>45147</td> <td>0.17</td> <td>179</td> <td>15</td> <td>MF</td> </tr> </tbody> </table> <p>The 'Compound Identification Results' window for Cpd 6: Carbofuran shows the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Score (Acq)</th> <th>Precursor (Acq)</th> <th>Find by MRM Product Ion</th> <th>Best</th> <th>Name</th> <th>Score</th> <th>RT</th> <th>ID Source</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>100</td> <td>164</td> <td>149</td> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td>Carbofuran</td> <td>100</td> <td>6.554</td> <td>Acq</td> </tr> </tbody> </table> <p>The 'MS Spectrum Results' window shows the mass spectrum for Cpd 6: Carbofuran, with peaks at m/z 131, 143, 145, and 183.</p>	Show/Hide	Cpd	ID Source	Name	RT	m/z	Polarity	Height	Width	m/z (prod.)	CE	Algorithm	<input checked="" type="checkbox"/>	3	Acq	trifluilin	5.863	306	Positive	57306	0.184	264	10	MF	<input checked="" type="checkbox"/>	4	Acq	chlorpropham	5.56	213	Positive	76755	0.143	171	5	MF	<input checked="" type="checkbox"/>	5	Acq	BHC Beta	6.645	219	Positive	65588	0.122	183	10	MF	<input checked="" type="checkbox"/>	6	Acq	Carbofuran	6.554	164	Positive	154610	0.191	149	10	MF	<input checked="" type="checkbox"/>	7	Acq	diazinon	7.288	304	Positive	45147	0.17	179	15	MF	Score (Acq)	Precursor (Acq)	Find by MRM Product Ion	Best	Name	Score	RT	ID Source	100	164	149	<input checked="" type="checkbox"/>	Carbofuran	100	6.554	Acq	
Show/Hide	Cpd	ID Source	Name	RT	m/z	Polarity	Height	Width	m/z (prod.)	CE	Algorithm																																																																															
<input checked="" type="checkbox"/>	3	Acq	trifluilin	5.863	306	Positive	57306	0.184	264	10	MF																																																																															
<input checked="" type="checkbox"/>	4	Acq	chlorpropham	5.56	213	Positive	76755	0.143	171	5	MF																																																																															
<input checked="" type="checkbox"/>	5	Acq	BHC Beta	6.645	219	Positive	65588	0.122	183	10	MF																																																																															
<input checked="" type="checkbox"/>	6	Acq	Carbofuran	6.554	164	Positive	154610	0.191	149	10	MF																																																																															
<input checked="" type="checkbox"/>	7	Acq	diazinon	7.288	304	Positive	45147	0.17	179	15	MF																																																																															
Score (Acq)	Precursor (Acq)	Find by MRM Product Ion	Best	Name	Score	RT	ID Source																																																																																			
100	164	149	<input checked="" type="checkbox"/>	Carbofuran	100	6.554	Acq																																																																																			

Figura 36 Risultati dell'algoritmo Find by MRM

5 Chiudere il file di dati.

a Selezionare **File > Close Data File**.b Fare clic su **Close**.

- Per salvare questi risultati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64.

2 Ricerca e identificazione

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

L'algoritmo Find Compounds by Integration identifica i composti sulla base dei risultati dell'integrazione. Per ogni picco identificato dall'integratore, viene creato un composto.

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D .	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati Pest - STD 200 MRM.d nella cartella di file d'esempio GC.</p> <p>c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Utilizzare il workflow General quando si lavora con dati GC/QQQ. Se si lavora con i dati GC/Q-TOF è invece possibile utilizzare il workflow General o GC/Q-TOF Compound Screening.

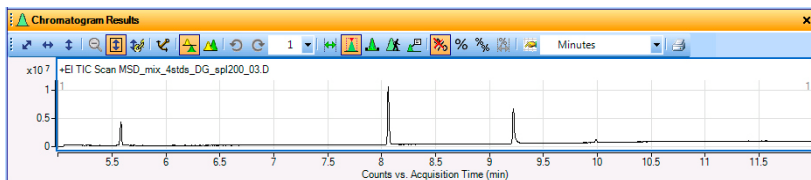


Figura 37 Cromatogramma TIC da MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2 Configurare l'interfaccia utente per utilizzare i dati GC.	<ul style="list-style-type: none">• Seguire le istruzioni in "Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS" a pagina 12.	
3 Ricercare i composti utilizzando l'algoritmo dell'integrazione.	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Find Compounds > Find by Integration.</p> <p>b Selezionare l'integratore MS/MS (GC).</p>	<ul style="list-style-type: none">• È possibile scegliere la regione del cromatogramma su cui eseguire la ricerca dei composti.• È possibile estrarre tutti i risultati completi di un composto trovato selezionando le voci di menu Compounds > Extract Complete Result Set dopo aver evidenziato il composto.

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
-----------	------------------------	----------

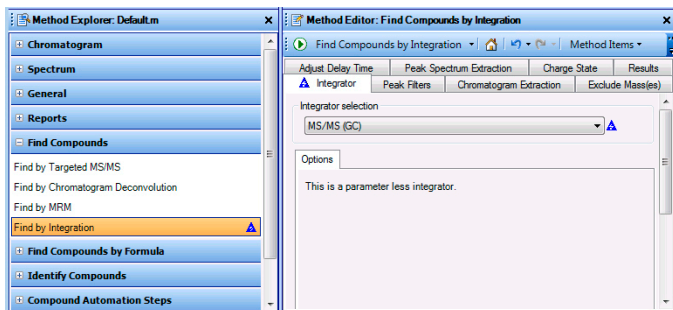



Figura 38 Scheda Integrator nella sezione Find by Integration di Method Editor

- c Fare clic su  per eseguire l'algoritmo **Find Compounds by Integrations** sul file di dati.
 - d Se necessario, selezionare il comando **View > Compound List**.
- Con queste condizioni, il programma Qualitative Analysis trova 6 composti.

4 Esaminare i composti. Vedere [Figura 36](#) a pagina 55.

- a Selezionare **2** nella casella **Maximum number of list panes** della barra degli strumenti MS Spectrum Results.
- b Fare clic sull'icona **Automatically Show Columns** nella finestra Compound List.
- c Selezionare il primo composto nella finestra Data Navigator.
- d Se la finestra Data Navigator è selezionata, utilizzare i tasti freccia per passare da un composto all'altro.

2 Ricerca e identificazione

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

Attività 15. Ricercare i composti mediante l'integrazione

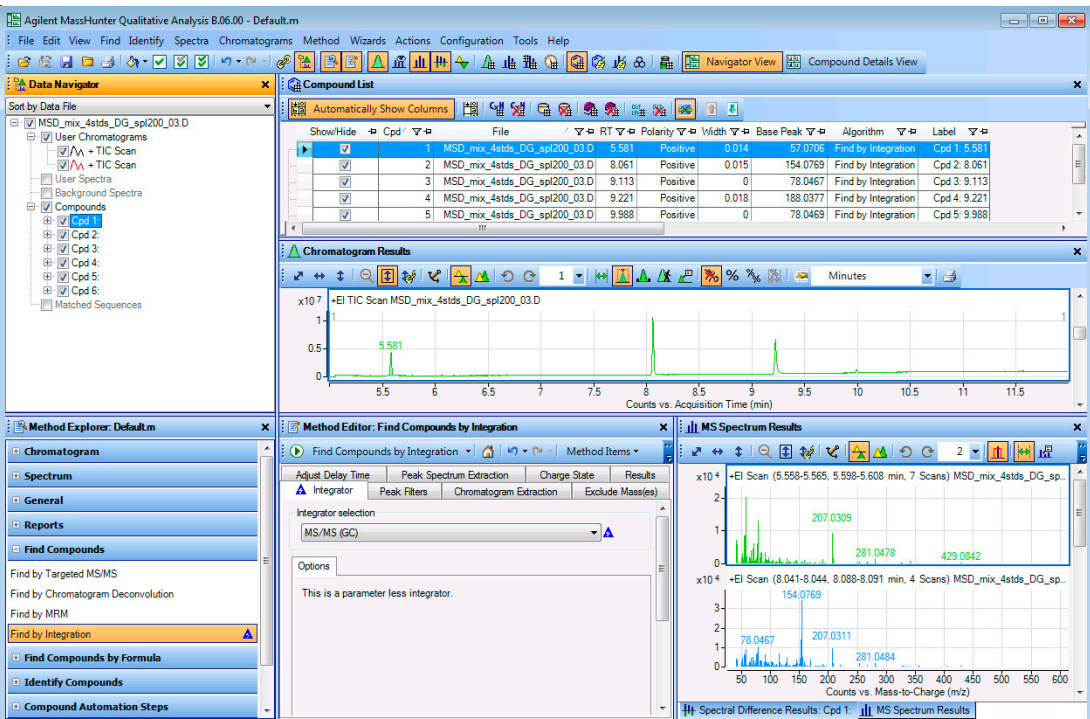
Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti																																										
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis software interface. The main window is divided into several panes:</p> <ul style="list-style-type: none">Data Navigator: Shows a tree view of the data file structure, including 'MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D', 'User Chromatograms', 'User Spectra', 'Background Spectra', and 'Compounds'.Compound List: A table listing identified compounds with columns for 'File', 'RT', 'Polarity', 'Width', 'Base Peak', 'Algorithm', and 'Label'.<table border="1"><thead><tr><th>File</th><th>RT</th><th>Polarity</th><th>Width</th><th>Base Peak</th><th>Algorithm</th><th>Label</th></tr></thead><tbody><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>5.581</td><td>Positive</td><td>0.014</td><td>57.0706</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 1: 5.581</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>8.061</td><td>Positive</td><td>0.015</td><td>154.0769</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 2: 8.061</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.113</td><td>Positive</td><td>0</td><td>78.0467</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 3: 9.113</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.221</td><td>Positive</td><td>0.018</td><td>188.0377</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 4: 9.221</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.988</td><td>Positive</td><td>0</td><td>78.0469</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 5: 9.988</td></tr></tbody></table>Chromatogram Results: A plot of 'EI TIC Scan MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D' showing peaks at retention times 5.581, 8.061, 9.113, 9.221, and 9.988 minutes.Method Explorer: Shows the 'Find Compounds by Integration' method selected under 'Find Compounds'.Method Editor: Displays the 'Find Compounds by Integration' method settings, including 'Integrator selection' set to 'MS/MS (GC)' and 'Options'.MS Spectrum Results: Two mass spectra are shown. The top spectrum is for 'EI Scan (5.550-5.565, 5.598-5.608 min, 7 Scans)' with peaks at 207.0309, 281.0478, and 429.0842. The bottom spectrum is for 'EI Scan (8.041-8.044, 8.088-8.091 min, 4 Scans)' with peaks at 78.0467, 154.0769, 207.0311, and 281.0484.	File	RT	Polarity	Width	Base Peak	Algorithm	Label	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	5.581	Positive	0.014	57.0706	Find by Integration	Cpd 1: 5.581	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	8.061	Positive	0.015	154.0769	Find by Integration	Cpd 2: 8.061	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.113	Positive	0	78.0467	Find by Integration	Cpd 3: 9.113	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.221	Positive	0.018	188.0377	Find by Integration	Cpd 4: 9.221	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.988	Positive	0	78.0469	Find by Integration	Cpd 5: 9.988	
File	RT	Polarity	Width	Base Peak	Algorithm	Label																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	5.581	Positive	0.014	57.0706	Find by Integration	Cpd 1: 5.581																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	8.061	Positive	0.015	154.0769	Find by Integration	Cpd 2: 8.061																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.113	Positive	0	78.0467	Find by Integration	Cpd 3: 9.113																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.221	Positive	0.018	188.0377	Find by Integration	Cpd 4: 9.221																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.988	Positive	0	78.0469	Find by Integration	Cpd 5: 9.988																																						

Figura 39 Risultati dell' algoritmo Find by Integration

5 Chiudere il file di dati.

- Selezionare **File > Close Data File**.
- Fare clic su **Close**.

- Per salvare questi risultati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64.

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

In questa attività vengono innanzitutto integrati ed estratti gli spettri del picco dal file di dati GC/Q-TOF. Dopo di che è possibile generare delle formule per ciascun spettro del picco.




Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC.</p> <p>c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se la casella Load result data non è disponibile, i risultati non sono stati salvati nel file di dati. Vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64 per le istruzioni sul salvataggio dei risultati.
2 Integrare ed estrarre gli spettri del picco.	<p>a Selezionare la sezione Chromatograms > Integrate (MS) nella finestra Method Explorer.</p> <p>b Selezionare la scheda Peak Filters.</p> <p>c Premere il pulsante Peak height.</p> <p>d Contrassegnare la casella di controllo Relative height.</p> <p>e Selezionare la casella Limit (by height) to the largest e digitare 4.</p> <p>f Selezionare Chromatograms > Integrate e Extract Peak Spectra.</p>	

2 Ricerca e identificazione

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>3 Generare le formule per ciascun spettro del picco.</p> <ul style="list-style-type: none">• Visualizzare Spectrum Identification Results List.• Chiudere la finestra MS Spectrum Results. <p>Suggerimento: Per ottenere gli stessi risultati della Figura 41, controllare di aver selezionato Common organic molecules come Isotope model.</p>	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Identify Compounds > Generate Formulas.</p> <p>b Nella finestra Method Editor, selezionare la scheda Charge State e scegliere Common organic molecules come Isotope model.</p> <p>c Nella finestra Data Navigator, evidenziare tutti gli spettri nella sezione User Spectra.</p> <p>d Selezionare il comando Identify > Generate Formulas from Spectrum Peaks o premere il pulsante Generate Formulas from Spectrum Peaks  per eseguire l'algoritmo.</p> <p>e Se necessario, fare clic sull'icona Spectrum Identification Results , o selezionare il comando View > Spectrum Identification Results.</p> <p>f Nella finestra Spectrum Identification Results, premere il pulsante Automatically Show Columns nella barra degli strumenti.</p> <p>g Fare clic sull'icona Hide Empty Columns  nella finestra Spectrum Identification Results.</p> <p>h Selezionare C6 H13 come risultato Best.</p> <p>i Espandere la tabella per quella riga.</p> <p>j Chiudere la finestra Method Editor.</p> <p>k Rivedere le formule e le specie di ioni visualizzate sopra molti picchi nella finestra MS Spectrum Results. Tutte le formule e le specie di ioni sono dello stesso colore dello spettro.</p>	<ul style="list-style-type: none">• È possibile visualizzare i rapporti di abbondanza isotopica previsti sul grafico dello spettro ingrandendo il valore m/z corrispondente. Consultare il Guida in linea per ulteriori informazioni.• L'icona Run  nella barra degli strumenti Method Editor consente talvolta di selezionare un'azione da una serie possibile. Ad esempio, facendo clic sull'icona Run in questa sezione, le azioni possibili sono due. Fare clic sulla freccia per visualizzare le azioni possibili e scegliere quella desiderata. Selezionando un'azione diversa si modifica l'azione predefinita. Premere semplicemente il pulsante Run per eseguire l'azione predefinita.• La larghezza di una colonna può essere modificata trascinando la linea che la separa dalle colonne a fianco.• È possibile spostare una colonna trascinandone la testata.• Una colonna può essere eliminata selezionando Remove column dal menu di scelta rapida della tabella.

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Passaggio

Istruzioni dettagliate

Commenti

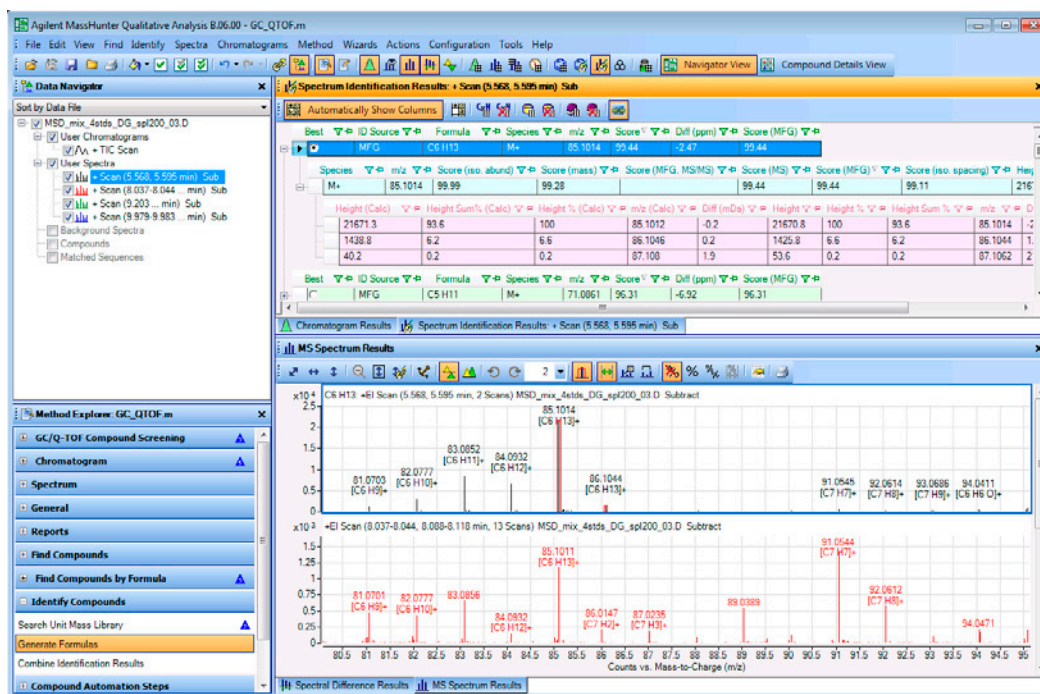



Figura 40 Risultati di Generate Formula per picchi da 1 a 4

- 4 Eseguire una ricerca nella libreria per gli spettri dei picchi da 1 a 4
 - a Nella finestra Data Navigator, fare clic su **User Spectra**.
 - b Nella finestra Method Explorer, selezionare **Identify Compounds > Search Unit Mass Library**.
 - c Controllare che la libreria selezionata sia valida.
 - d Fare clic su **Identify > Search Library for Spectra** dal menu principale.
 - e Chiudere la finestra Method Editor.
- La finestra Method Editor si apre automaticamente selezionando una sezione in Method Explorer.

2 Ricerca e identificazione

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
5 Modificare le colonne visualizzate.	<p>a Selezionare con il tasto destro la finestra Spectrum Identification Results e fare clic su Add/Remove Columns. Nella finestra di dialogo "(Enhanced) Add/Remove Columns", contrassegnare le colonne da visualizzare. Fare clic su OK.</p> <p>b Chiudere la finestra Method Editor.</p> <p>c Fare clic sull'icona Hide Empty Columns  nella finestra Spectrum Identification Results.</p> <p>d Rivedere le formule e le specie di ioni visualizzate sopra ciascun picco nella finestra MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Se si utilizza il comando Remove Column e si rimuove una colonna che contiene dati, il software rivisualizza automaticamente questa colonna se è attiva la funzione Automatically Show Columns.• L'algoritmo LibSearch è prioritario nella sezione Combine Identification Results del metodo. È possibile scegliere manualmente il risultato MFG migliore o modificare il sistema di combinazione dei risultati dell'identificazione.

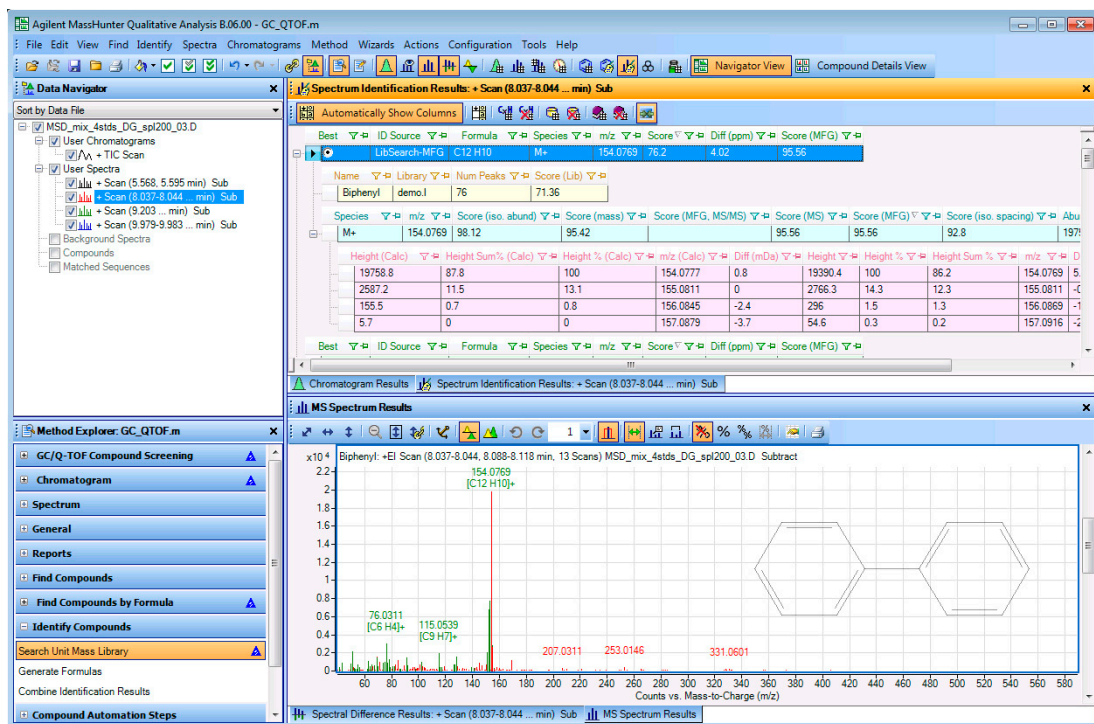


Figura 41 Risultati di Library Search e Generate Formulas per gli spettri dei primi picchi

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Attività 16. Generare formule e libreria di ricerca per gli spettri del picco

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
6	<p>Rivedere i risultati di ciascun spettro nella finestra MS Peaks One.</p> <p>a Selezionare View > MS Spectrum Peak List 1.</p> <p>b Selezionare con il tasto destro Add/Remove Columns.</p> <p>c Controllare che le colonne in Figura 42 sia nell'elenco Show these columns.</p> <p>d Classificare selezionando la colonna Ion Type.</p> <p>e Se il tipo di ione e uno ione frammentato, le formule e le specie di ioni visualizzate sono indicate in vede su ciascun picco nella finestra MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Gli ioni frammentati sono indicati in verde nella finestra MS Spectrum Results. • Le opzioni per Ion Type sono Molecular Ion, Fragment Ion o nessuno. Scegliendo l'opzione Fragment Ion, la colonna Loss Formula and Loss Mass contiene la formula e la massa che necessarie per ottenere questo ione dallo ione molecolare. In Formula & Ion Species sono indicate le formule e le specie di ioni per questo tipo di ione.

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]+	C7H	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
75.0223	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

Figura 42 Tabella MS Peaks One con le colonne **Ion Type**, **Loss Formula**, **Loss Mass**, e **Formula & Ion Species**

- | | | |
|--|---|--|
| 7 (opzionale) Chiudere il file di dati. | a Selezionare File > Close Data File . | • Per salvare questi risultati, vedere "Attività 17. Salvare i risultati" a pagina 64. |
| • Passare all'attività successiva per informazioni sulla procedura di salvataggio dei risultati. | b Fare clic su Close . | |

Attività 17. Salvare i risultati

In questa attività, vengono salvati i risultati del file di dati corrente.

Attività 17. Salvare i risultati

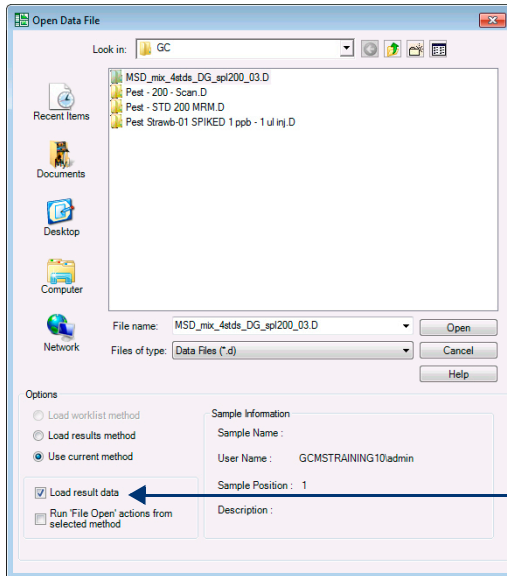
Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Salvare i risultati del file di dati corrente e chiudere il file di dati.	<p>a Selezionare File > Save Results.</p> <p>b Selezionare File > Close Data File.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Per un file di dati è possibile salvare una sola serie di risultati. Se sono già stati salvati dei risultati per questo file di dati, tali risultati saranno sovrascritti nel momento in cui si seleziona File > Save Results.
2 Aprire il file di dati e caricare i risultati.	<p>a Selezionare File > Open Data File. Si apre la finestra di dialogo "Open Data File".</p> <p>b Scegliere un file di dati. Selezionare ad esempio il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Contrassegnare la casella di controllo Load result data.</p> <p>d Fare clic sul pulsante Open.</p>	

Attività 17. Salvare i risultati

Passaggio

Istruzioni dettagliate

Commenti



Casella di controllo Load result contrassegnata.

Figura 43 Finestra di dialogo Open Data File

- 3** Esaminare i risultati.
- a** Selezionare la finestra **Spectrum Identification Results**.
 - b** Rivedere i risultati.

2 Ricerca e identificazione

Attività 17. Salvare i risultati

Attività 17. Salvare i risultati

Passaggio

Istruzioni dettagliate

Commenti

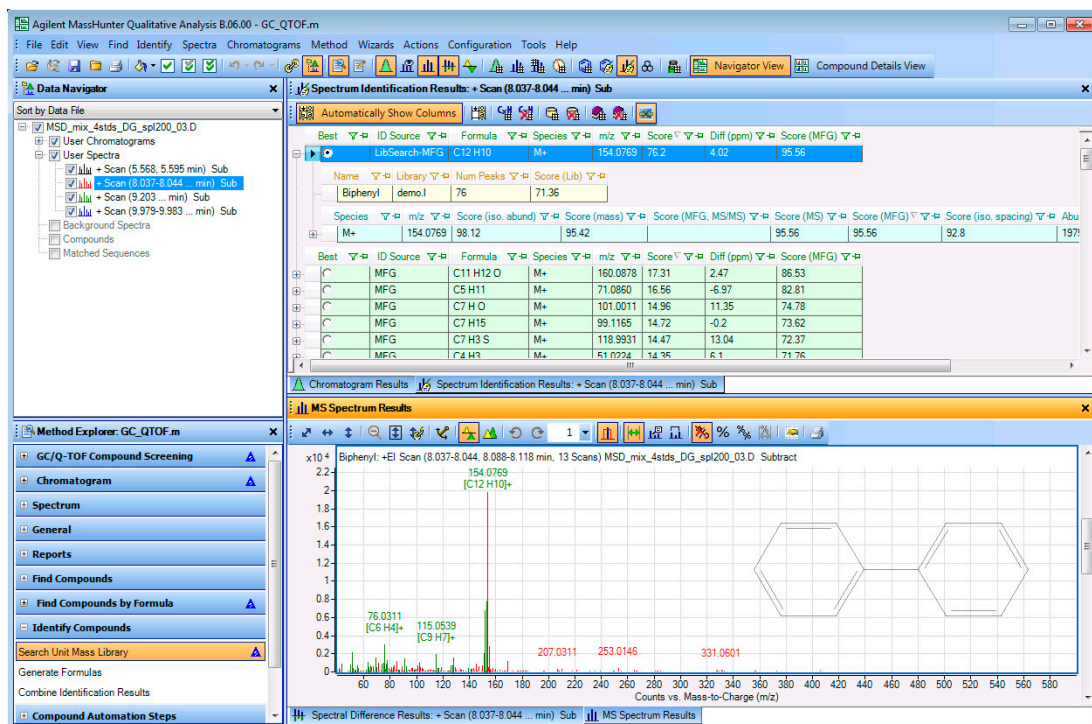


Figura 44 Risultati di Library Search e Generate Formulas per gli spettri dei primi picchi

4 Chiudere il file di dati.

- Selezionare **File > Close Data File**.
- Fare clic su **Close**.

5 Riaprire il file di dati e non caricare i risultati.

- Selezionare **File > Open**. Si apre la finestra di dialogo "Open Data File".
 - Scegliere un file di dati. Selezionare ad esempio il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.
 - Deselezionare la casella di controllo **Load result data**.
 - Fare clic sul pulsante **Open**.
- Se i risultati non vengono caricati, per impostazione predefinita il programma apre un TIC all'apertura di un file di dati. Se si contrassegna la casella di controllo Run 'File Open' actions from selected method, vengono eseguite le azioni di File Open. Consultare la Guida in linea per ulteriori informazioni.

Attività 17. Salvare i risultati

Passaggio

Istruzioni dettagliate

Commenti

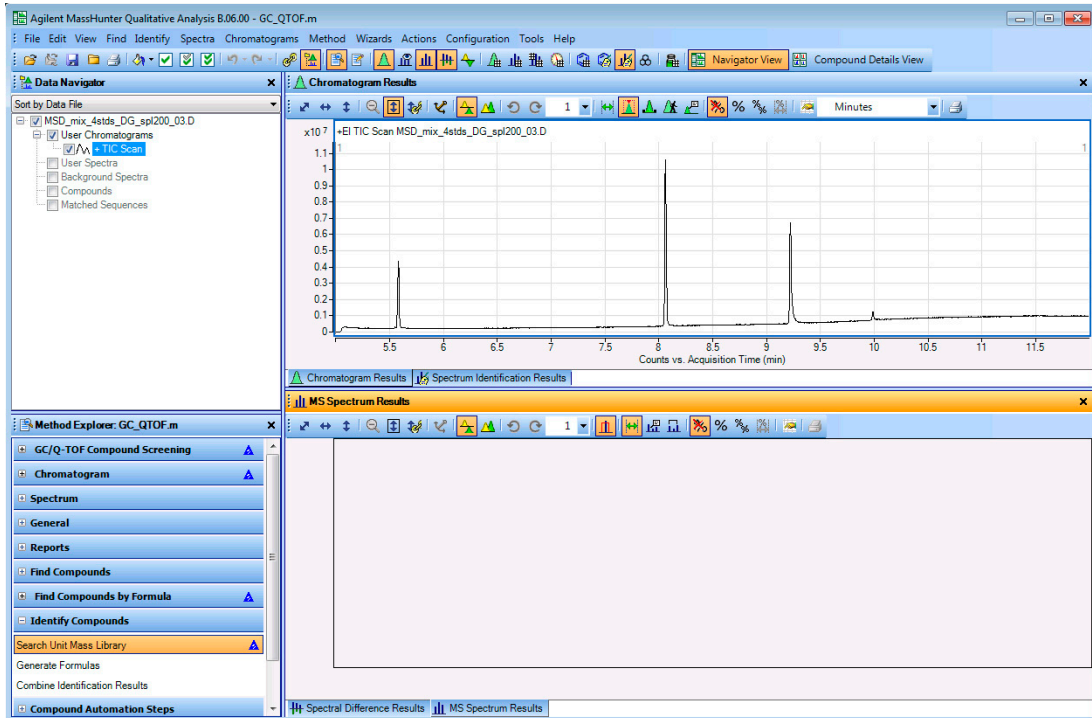


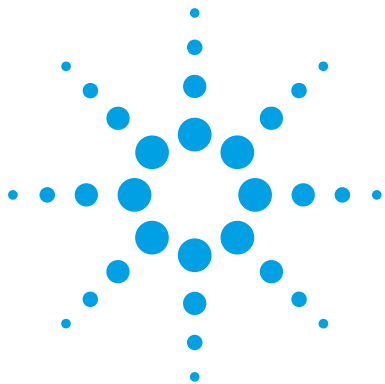
Figura 45 Risultati di Library Search e Generate Formulas per gli spettri dei primi picchi

6 Chiedere il file di dati.

- a Selezionare **File > Close Data File**.
- b Fare clic su **Close**.

2 Ricerca e identificazione

Attività 17. Salvare i risultati



3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General 70

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening 75

Attività 20. Esportare un file CEF 79

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi 80

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti 84

In questa attività viene spiegato come impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa. All'apertura del file di dati, vengono eseguite le azioni all'interno del metodo automatico.

Per questi esempi vengono utilizzati due diversi workflow. Per ulteriori informazioni vedere [“Workflow”](#) a pagina 97.

Il workflow General supporta i dati GC/QQQ, GC/Q-TOF e LC/MS. Il workflow GC/Q-TOF Compound Screening supporta i dati GC/Q-TOF.

Ciascun esercizio è riassunto in una tabella di tre colonne:

- Passi - Seguire tali istruzioni generali per procedere da soli e scoprire il programma.
- Istruzioni dettagliate - Seguire queste istruzioni in caso di dubbio o se si preferisce procedere gradatamente alla conoscenza del programma.
- Commenti – Consigli e informazioni aggiuntive su ciascun passo dell'esercitazione.



Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Se si utilizza il programma Qualitative Analysis per la prima volta, viene caricato il metodo default.m. È possibile apportare delle modifiche al metodo aperto e salvarlo, oppure si può aprire un metodo nuovo, modificarlo e salvarlo. Il metodo default.m. non può essere sovrascritto.

Inoltre, è possibile impostare determinate azioni per il metodo da eseguire all'apertura di un file di dati. Quando si apre un file di dati, è possibile anche caricare il metodo che è stato utilizzato per creare i risultati memorizzati insieme al file di dati. Questo metodo viene salvato automaticamente ogni volta che si salvano i dati con il file di dati. Il workflow General può essere utilizzato con i file di dati GC/MS o LC/MS.

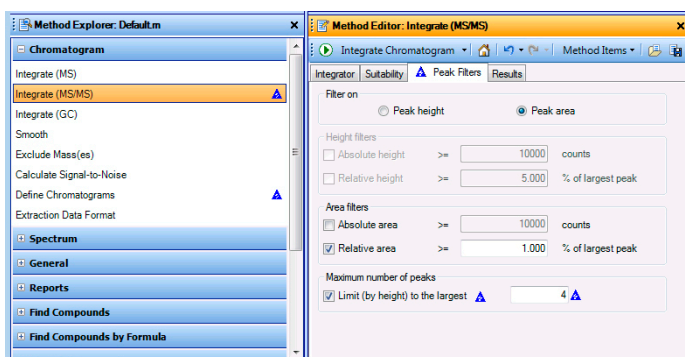
Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati Pest - STD 200 MRM.d .	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati Pest - STD 200 MRM.d nella cartella di file d'esempio GC.</p> <p>c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se si lavora con i dati GC/MS è invece possibile utilizzare il workflow General o GC/Q-TOF Compound Screening.
2 Configurare l'interfaccia utente per utilizzare i dati GC.	<ul style="list-style-type: none"> Seguire le istruzioni in "Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS" a pagina 12. 	<ul style="list-style-type: none"> Per questo esempio, selezionare il workflow General.
3 Impostare il metodo per estrarre un cromatogramma TIC. <ul style="list-style-type: none"> Definire un cromatogramma TIC per i dati MS. 	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Chromatogram > Define Chromatograms.</p> <p>b Eliminare il cromatogramma BPC.</p> <p>c Selezionare TIC come Type.</p> <p>d Controllare che MS Level sia su MS/MS.</p> <p>e Fare clic su Add.</p>	

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General


Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>4 Modificare il metodo per integrare i dati.</p> <ul style="list-style-type: none"> Limitare l'integrazione ai quattro picchi più alti. 	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Selezionare la scheda Peak Filters.</p> <p>c Nella sezione Maximum number of peaks, contrassegnare la casella di controllo Limit (by height) to the largest.</p> <p>d Digitare 4.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se si aggiorna un valore nella scheda Peak Filters della sezione Chromatogram > Integrate (MS) vengono aggiornati anche i valori di altre sezioni di Method Explorer. Compaiono dei triangoli blu che visualizzano altre sezioni.



Per salvare il metodo corrente è possibile selezionare l'icona Save Method.

Figura 46 Scheda Chromatogram > Integrate (MS/MS) > Peak Filters

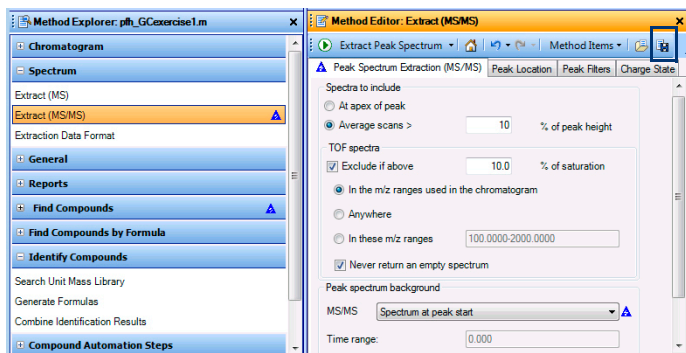
<p>5 Controllare l'integrazione per assicurarsi che vengano visualizzati solo i 4 picchi integrati.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Fare clic sull'icona Integrate Chromatogram  per integrare il file di dati. 	
<p>6 Salvare il metodo con il nome <i>iii_GCexercise1</i>, dove <i>iii</i> stanno per le iniziali dell'operatore.</p>	<p>a Dal menu in alto, selezionare Method > Save As.</p> <p>b Digitare <i>iii_GCexercise1</i>.</p> <p>c Fare clic sul pulsante Save.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Quando si salva il metodo, tutti i triangoli blu che stanno ad indicare valori modificati nel metodo aperto scompaiono.
<p>7 Modificare il fondo dello spettro del picco per utilizzare lo spettro all'inizio di un picco.</p>	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>b Selezionare Peak Spectrum Extraction (MS/MS).</p> <p>c In Peak spectrum background, selezionare Spectrum at peak start.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se si apportano ulteriori modifiche dopo aver salvato il metodo, i triangoli blu vengono nuovamente visualizzati.

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General




Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------




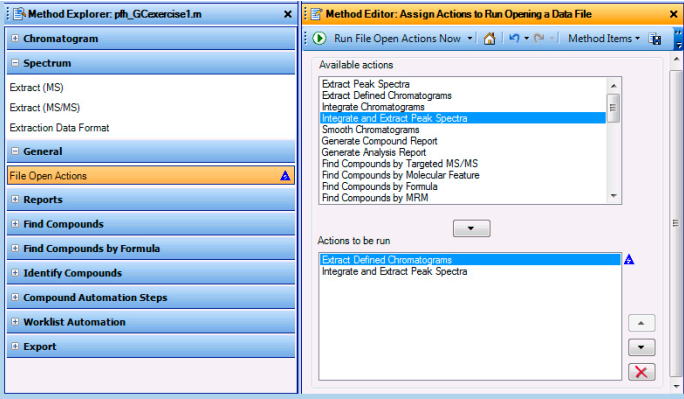

Per salvare il metodo corrente è possibile selezionare l'icona Save Method.

Figura 47 Scheda Spectrum > Extract (MS/MS) > Peak Spectrum Extraction (MS/MS)

- | | |
|--|--|
| <p>8 Controllare l'estrazione dello spettro MS per assicurarsi che lo spettro di fondo sia sottratto.</p> | <ul style="list-style-type: none">Fare clic sull'icona Extract Peak Spectrum  per eseguire l'azione sul picco selezionato nel file di dati. |
| <p>9 Salvare il metodo.</p> | <ul style="list-style-type: none">È possibile salvare il metodo in tre modi:<ul style="list-style-type: none">Selezionare l'icona Save Method in Method Editor. Fare clic con il tasto destro su Method Editor, e selezionare Save Method.Dal menu in alto, selezionare Method > Save.L'icona Save Method è illustrata nella Figura 47 a pagina 72 |
| <p>10 Impostare il metodo per automatizzare le azioni (i cui parametri sono stati appena modificati) all'apertura di un file di dati.</p> <ul style="list-style-type: none">Elencare le azioni da eseguire all'apertura di questo o di un altro file di dati. | <p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare General > File Open Actions.</p> <p>b Selezionare Integrate and Extract Peak Spectra dall'elenco Available actions.</p> <p>c Premere il pulsante Add, , per spostare l'azione selezionata nell'elenco Actions to be run. È anche possibile fare doppio clic sull'azione selezionata per spostarla nell'altro elenco.</p> |
- Suggerimento: vedere la voce General in Method Explorer.

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
11 Controllare File Open Actions.	<ul style="list-style-type: none"> Fare clic sull'icona Run File Open Actions Now  per eseguire le azioni sul file di dati. 	<ul style="list-style-type: none"> I cromatogrammi e gli spettri non vengono sovrascritti. Vengono aggiunti nuovi cromatogrammi e nuovi spettri.
 <p>The screenshot shows two windows. On the left is 'Method Explorer: pth_GCexercise1.m' with a tree view where 'File Open Actions' is selected under the 'General' category. On the right is 'Method Editor: Assign Actions to Run Opening a Data File'. It features two lists: 'Available actions' containing 'Extract Peak Spectra', 'Extract Defined Chromatograms', 'Integrate Chromatograms', 'Integrate and Extract Peak Spectra', 'Smooth Chromatograms', 'Generate Compound Report', 'Generate Analysis Report', 'Find Compounds by Targeted MS/MS', 'Find Compounds by Molecular Feature', 'Find Compounds by Formula', and 'Find Compounds by MRM'; and 'Actions to be run' containing 'Extract Defined Chromatograms' and 'Integrate and Extract Peak Spectra'.</p>		
<p>Nell'elenco Actions to be run sono visualizzate due azioni diverse. La prima azione deve estrarre i cromatogrammi definiti, poi il cromatogramma viene integrato e i picchi vengono estratti.</p>		
<p>Figura 48 Sezione General > File Open Actions in Method Editor</p>		
12 Salvare il metodo.	<ul style="list-style-type: none"> Selezionare l'icona Save Method nella finestra Method Editor. 	
<p>13 Impostare il metodo per automatizzare le azioni all'esecuzione del metodo durante una lista di lavoro.</p> <ul style="list-style-type: none"> Elencare le azioni da eseguire all'apertura di questo o di un altro file di dati. 	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Worklist Automation > Worklist Actions.</p> <p>b Rimuovere Generate Analysis Report dall'elenco Actions to be run.</p>	
<p>Suggerimento: vedere la voce Worklist Automation nella finestra Method Explorer</p>		
14 Controllare Worklist Actions.	<ul style="list-style-type: none"> Fare clic sull'icona Run Worklist Actions Now  per eseguire le azioni sul file di dati. 	<ul style="list-style-type: none"> I cromatogrammi e gli spettri non vengono sovrascritti. Vengono aggiunti nuovi cromatogrammi e nuovi spettri.

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

Attività 18. Impostare ed eseguire un metodo di analisi qualitativa mediante il workflow General

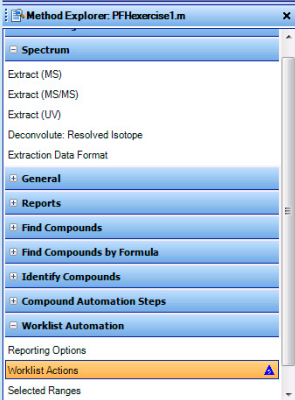
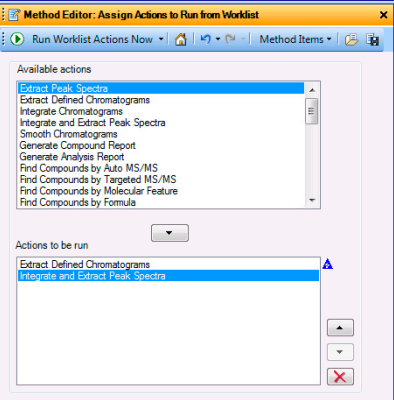
Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
		<p>In un metodo sono presenti due diversi elenchi di azioni. Il primo elenco di azioni (File Open Actions) può essere eseguito all'apertura di un file di dati. Il secondo elenco di azioni (Worklist Actions) viene attuato all'esecuzione del metodo.</p>

Figura 49 Sezione Worklist Automation > Worklist Actions in Method Editor

- 15** Salvare il metodo e chiudere il file di dati senza salvare i risultati.
- a** Selezionare l'icona **Save Method** in Method Editor.
 - b** Selezionare **File > Close Data File**, quindi scegliere **No** quando il sistema chiede di salvare i risultati.

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

In questa attività viene impostato un metodo di analisi qualitativa che contiene una serie di azioni analitiche da eseguire in una data sequenza. Tra le azioni possibili, l'estrazione e l'integrazione di cromatogrammi, l'estrazione di spettri, la ricerca di spettri del picco in una libreria, la generazione di formule per gli spettri e la stampa di un rapporto di analisi.

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il TIC per il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none"> a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File. b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC. c Non contrassegnare la casella di controllo Load result data e selezionare Open. 	
2 Configurare l'interfaccia utente per utilizzare i dati GC.	<ul style="list-style-type: none"> • Seguire le istruzioni in "Attività 2. Configurare l'interfaccia utente per i dati GC/MS" a pagina 12. 	<ul style="list-style-type: none"> • Per questo esempio, selezionare il workflow GC/Q-TOF Compound Screening.
3 Controllare che sia estratto un TIC.	<ul style="list-style-type: none"> a Nella finestra Method Explorer, selezionare Chromatogram. b Selezionare la sezione Define Chromatograms. c Nella finestra Method Editor, controllare che il cromatogramma nella sezione Defined chromatograms sia un TIC. Altrimenti, selezionare TIC in Type. Premere il pulsante Change. 	<ul style="list-style-type: none"> •

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa


Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
4 Rivedere i parametri dell'algoritmo Find by Chromatogram Deconvolution.	<p>a Selezionare la sezione GC/Q-TOF Compound Screening > Find by Chromatogram Deconvolution nella finestra Method Explorer.</p> <p>b Selezionare la scheda Mass Filter.</p> <p>c Impostare il valore Absolute height su 13000.</p> <p>d Selezionare la scheda Results.</p> <p>e Premere il pulsante Highlight all compounds.</p> <p>f Rivedere i risultati su ciascuna scheda.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Controllare le sezioni del workflow GC/Q-TOF Compound Screening.• Notare la presenza di sei sezioni per questo workflow. Tutte queste sezioni sono duplicati di sezioni che appartengono già a Method explorer.• I triangoli blu vengono visualizzati in altre sezioni di Method Explorer ad indicare che i valori dello stesso parametro sono stati cambiati anche da qualche altra parte.
5 Rivedere i parametri dell'algoritmo Identify by Library Search.	<p>a Selezionare la sezione GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by library search nella finestra Method Explorer.</p> <p>b Premere il pulsante Add Library. Selezionare una libreria e fare clic su Open.</p> <p>c (opzionale) Premere il pulsante Remove Library per rimuovere una libreria se non si intende utilizzarla.</p> <p>d Rivedere i parametri su ciascuna scheda.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Il file demo.l library o NIST08.l (o un'altra versione della libreria NIST) è installato nella cartella \MassHunter\Library.
6 Salvare il metodo con il nome <i>iii_GCexercise2</i> , dove <i>iii</i> stanno per le iniziali dell'operatore.	<p>a Dal menu in alto, selezionare Method > Save As.</p> <p>b Digitare <i>iii_GCexercise2</i>.</p> <p>c Fare clic sul pulsante Save.</p>	

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

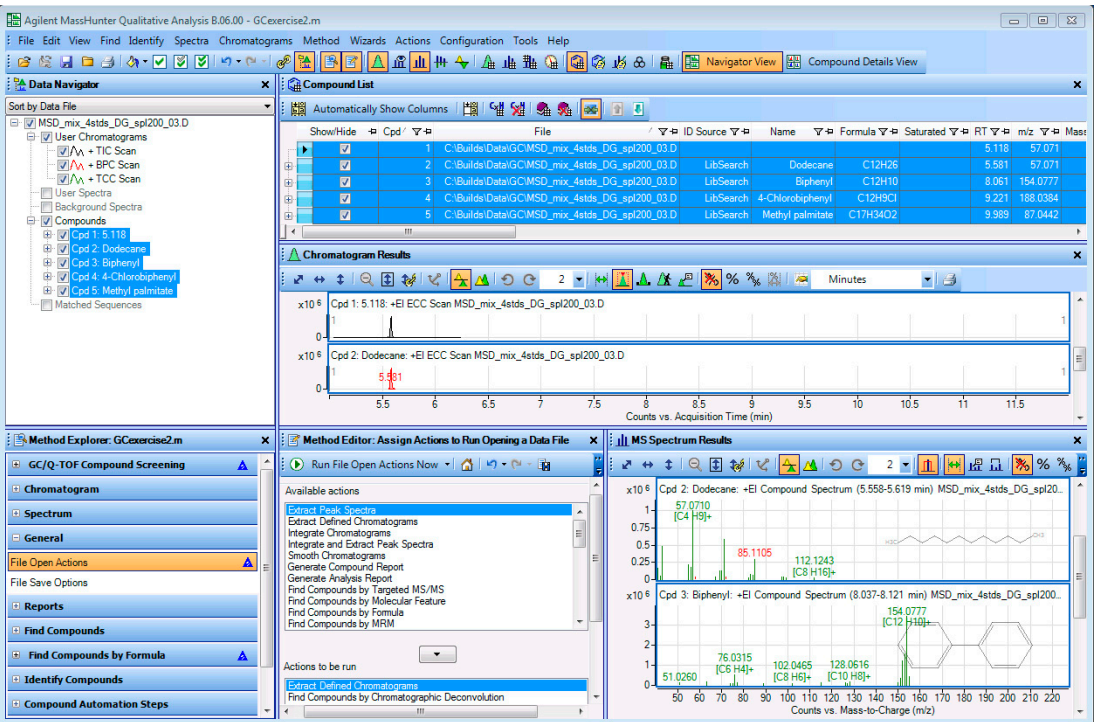
Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>7 Impostare il metodo per automatizzare le azioni all'apertura di un file di dati.</p> <ul style="list-style-type: none"> Elencare le azioni da eseguire all'apertura di questo o di un altro file di dati. <p>Suggerimento: vedere la voce General nella finestra Method Explorer.</p>	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare General > File Open Actions.</p> <p>b Rimuovere Generate Analysis Report dall'elenco Actions to be run.</p> <p>c Rimuovere Integrate and Extract Peak Spectra.</p> <p>d Rimuovere qualsiasi altra azione dell'elenco.</p> <p>e Aggiungere Extract Defined Chromatograms.</p> <p>f Aggiungere Find Compounds by Chromatographic Deconvolution.</p> <p>g Aggiungere Search Spectral Library for Compound.</p>	
<p>8 Controllare File Open Actions.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Fare clic sull'icona Run 'File Open' Actions Now  per eseguire le azioni sul file di dati. 	<ul style="list-style-type: none"> I cromatogrammi e gli spettri non vengono sovrascritti. Vengono aggiunti nuovi cromatogrammi e nuovi spettri.

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 interface. The top menu bar includes File, Edit, View, Find, Identify, Spectra, Chromatograms, Method, Wizards, Actions, Configuration, Tools, and Help. The main workspace is divided into several panes: 1. Data Navigator: Shows a tree view of the project structure, including 'MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D', 'User Chromatograms', 'Background Spectra', and 'Compounds'. 2. Compound List: A table listing five compounds with their respective file paths, IDs, names, formulas, and retention times. 3. Chromatogram Results: Displays two chromatograms for 'Cpd 1: 5.118: +EI ECC Scan MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D' and 'Cpd 2: Dodecane: +EI ECC Scan MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D'. 4. MS Spectrum Results: Shows mass spectra for 'Cpd 2: Dodecane' and 'Cpd 3: Biphenyl', with chemical structures and key peaks labeled. 5. Method Explorer: A sidebar on the left with a tree view containing 'GC/Q-TOF Compound Screening', 'Chromatogram', 'Spectrum', and 'General'. 6. Method Editor: A central pane titled 'Assign Actions to Run Opening a Data File' with a list of available actions like 'Extract Peak Spectrum' and 'Integrate Chromatograms'.</p>	
9	<p>Salvare il metodo con il nome <i>iii</i>_GCexercise2, dove <i>iii</i> stanno per le iniziali dell'operatore.</p> <p>a Dal menu, selezionare Method > Save As. b Digitare <i>iii</i>_GCexercise2. c Selezionare Save.</p>	<ul style="list-style-type: none">Se il metodo viene eseguito durante una lista di lavoro Data Acquisition, le Worklist Actions di questa scheda vengono condotte nella sequenza indicata.
10	<p>Chiudere il file di dati senza salvare i risultati.</p> <p>a Selezionare File > Close Data File. b Selezionare No quando il sistema chiede di salvare i risultati.</p>	

Attività 20. Esportare un file CEF

È possibile esportare un file CEF che contiene informazioni sui composti. Il file CEF può essere importato in altri programmi come MassHunter Quantitative Analysis e Mass Profiler Professional. Si possono inoltre importare i composti che sono stati esportati in un file CEF.

Attività 20. Esportare un file CEF

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
1 Aprire il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d ed eseguire File Open actions per il metodo <i>iii_GCexercise2.m</i> creato in "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75.	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC.</p> <p>c Deselezionare la casella di controllo Load result data.</p> <p>d Contrassegnare la casella di controllo Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Premere il pulsante Use current method e fare clic su Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75 è stata terminata, il metodo corrente è <i>iii_GCexercise2.m</i>. Questo metodo esegue l'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e l'algoritmo Search Library su ciascun composto.
2 Esportare un file CEF.	<p>a Per esportare in modo interattivo il file, selezionare File > Export > as CEF.</p> <p>b Premere il pulsante All results.</p> <p>c Selezionare la posizione del file esportato.</p> <p>d Fare clic su OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Un file CEF viene utilizzato per esportare dei composti.

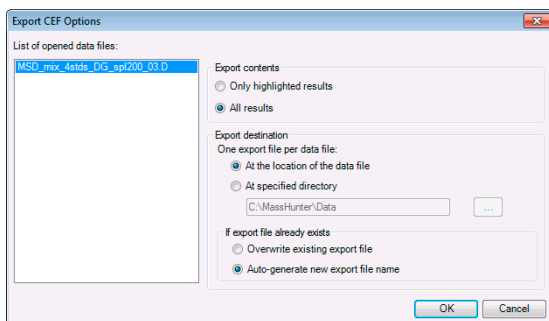


Figura 51 Finestra di dialogo Export CEF Options

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi

Seguire queste istruzioni per stampare un rapporto di analisi dopo aver concluso le attività di questa esercitazione o della successiva.

Un rapporto di analisi può contenere i risultati dell'esportazione e dell'integrazione dei cromatogrammi, dell'estrazione degli spettri, della ricerca dei composti, della ricerca del database per gli spettri del picco e della generazione delle formule dagli spettri del picco.

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Se il file MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d non è caricato, aprirlo ed eseguire File Open actions per il metodo <i>iii_GCexercise2.m</i> creato in "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75.</p>	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC.</p> <p>c Deselezionare la casella di controllo Load result data.</p> <p>d Contrassegnare la casella di controllo Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Premere il pulsante Use current method e fare clic su Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Se "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75 è stata terminata, il metodo corrente è <i>iii_GCexercise2.m</i>. Questo metodo esegue l'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e l'algoritmo Search Library su ciascun composto.
<p>2 Modificare le opzioni di selezione del rapporto di analisi nel metodo:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Contrassegnare le caselle di controllo dei cromatogrammi, degli spettri o delle tabelle da stampare. • Deselezionare le caselle di controllo dei cromatogrammi, degli spettri o delle tabelle che non si intende stampare. 	<p>a Nella finestra Method Explorer, selezionare Reports > Analysis Report.</p> <p>b Contrassegnare le caselle di controllo degli altri elementi da stampare</p> <p>c Deselezionare le opzioni dei cromatogrammi e degli spettri che non si intende stampare.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Il rapporto di analisi contiene solo le informazioni contrassegnate in questa sezione. • Se alcuni risultati non sono disponibili, non vengono inclusi nonostante siano stati contrassegnati in questa sezione. Ad esempio, se il cromatogramma non è stato integrato, la tabella dei picchi non sarà inclusa.

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi (segue)

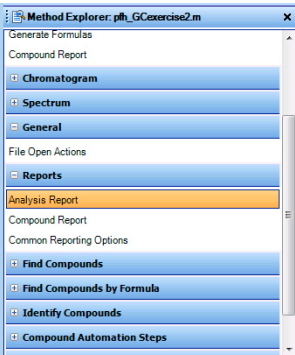
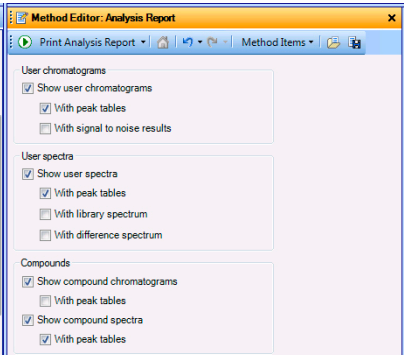


Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
		<p>Per impostazione predefinita, la finestra Method Editor è mobile. Viene visualizzata come finestra separata dal resto del programma Qualitative Analysis. Per ancorare la finestra, selezionare il titolo della finestra, selezionare il titolo della finestra, con il tasto destro del mouse e scegliere Floating. Per ancorarla è anche possibile fare doppio clic sulla barra del titolo.</p>

Figura 52 Sezione Analysis Report nelle finestre Method Explorer e Method Editor

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
3 Stampare il rapporto.	<p>a Sono possibili diverse soluzioni per stampare il rapporto in modo interattivo:</p> <ul style="list-style-type: none">• Da menu principale, selezionare File > Print > Analysis Report.• Dalla barra degli strumenti principale, selezionare l'icona Printer.• Fare clic sull'icona Print Analysis Report  nella barra degli strumenti Method Editor quando la sezione Analysis Report è selezionata.• Fare clic con il tasto destro nella sezione Analysis Report in Method Editor, quindi selezionare Print Analysis Report.• Menu di scelta rapida del file di dati in Data Navigator, selezionare Analysis Report. <p>b Selezionare Report contents.</p> <p>c Contrassegnare la casella di controllo Print report e selezionare una stampante.</p> <p>d Contrassegnare la casella di controllo Print preview.</p> <p>e Premere il pulsante OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• L'icona Run  nella barra degli strumenti Method Editor consente talvolta di selezionare un'azione da una serie possibile. Ad esempio, per passare alla sezione Reports > Common Reporting Options nella finestra Method Editor, l'icona Run offre quattro azioni possibili da selezionare. Fare clic sulla freccia per visualizzare le azioni possibili e scegliere quella desiderata. Selezionando un'azione diversa si modifica l'azione predefinita. Premere semplicemente il pulsante Run per eseguire l'attuale azione predefinita.

Attività 21. Stampare un rapporto di analisi (segue)

Passi	Istruzioni dettagliate	Commenti
-------	------------------------	----------

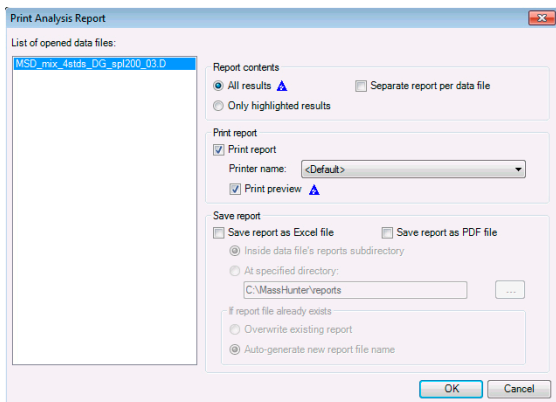


Figura 53 Finestra di dialogo Print Analysis Report

- f** Rivedere il rapporto.
- g** Fare clic sull'icona **Close Print Preview** nella barra degli strumenti.

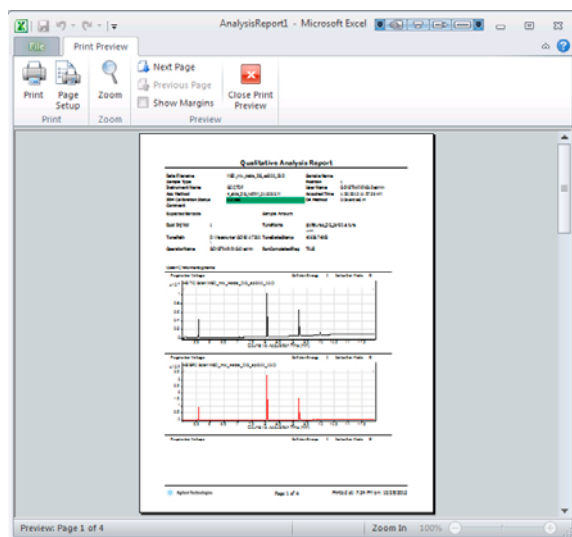


Figura 54 Finestra Print Preview con il rapporto di analisi

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti

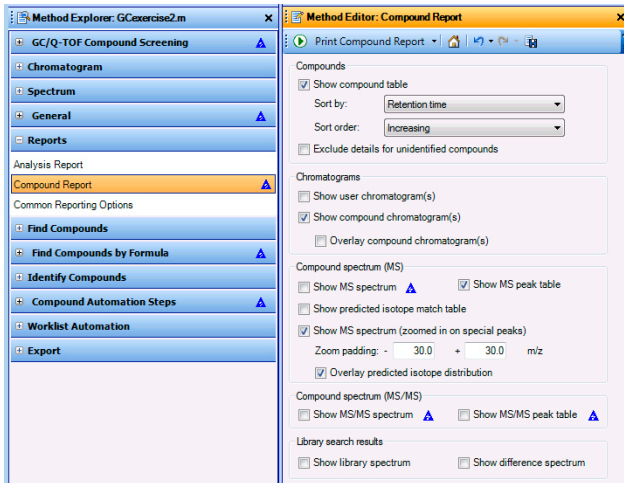
Seguire queste istruzioni per stampare un rapporto sui composti.

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
<p>1 Se il file MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d non è caricato, aprirlo ed eseguire File Open actions per il metodo <i>iii_GCexercise2.m</i> creato in "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75.</p>	<p>a Se il programma non si apre, fare doppio clic sull'icona Mass Hunter Qualitative Analysis. Oppure, selezionare File > Open Data File.</p> <p>b Selezionare il file di dati MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nella cartella del file di dati d'esempio GC.</p> <p>c Deselezionare la casella di controllo Load result data.</p> <p>d Contrassegnare la casella di controllo Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Premere il pulsante Use current method e fare clic su Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se "Attività 19. Impostare ed eseguire un metodo mediante il workflow GC/Q-TOF Compound Screening" a pagina 75 è stata terminata, il metodo corrente è <i>iii_GCexercise2.m</i>. Questo metodo esegue l'algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e l'algoritmo Search Library su ciascun composto.
<p>2 Modificare alcune opzioni del metodo per il rapporto sui composti:</p> <ul style="list-style-type: none"> Disattivare la visualizzazione degli spettri MS ingranditi su picchi specifici. Disattivare le opzioni MS/MS nel rapporto. 	<p>a In Method Explorer, selezionare Reports > Compound Report.</p> <p>b Deselezionare la casella Show MS spectrum.</p> <p>c Deselezionare la casella Show MS/MS spectrum.</p> <p>d Deselezionare la casella how MS/MS peak table.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Queste caselle consentono di specificare le informazioni da includere nel rapporto qualora siano disponibili. Se le informazioni non sono disponibili, la sezione specifica viene automaticamente saltata. Ad esempio, i risultati MS/MS non vengono mai inclusi se il file di dati contiene solo dati MS.

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
-----------	------------------------	----------



La casella di controllo Overlay compound chromatograms non deve essere selezionata per i dati GC/Q-TOF.

Figura 55 Sezione Compound Report in Method Editor

- 3** (opzionale) Scegliere un modello di differente per il rapporto sui composti.
- a** Nella finestra Method Explorer, selezionare **Reports > Common Reporting Options**.
 - b** Selezionare **CompoundReport WithIdentificationHits.xlsx** in Compound report template.

- Il software offre diversi tipi di modelli per il rapporto.
- È possibile personalizzare un modello di rapporto utilizzando Excel e Report Designer.

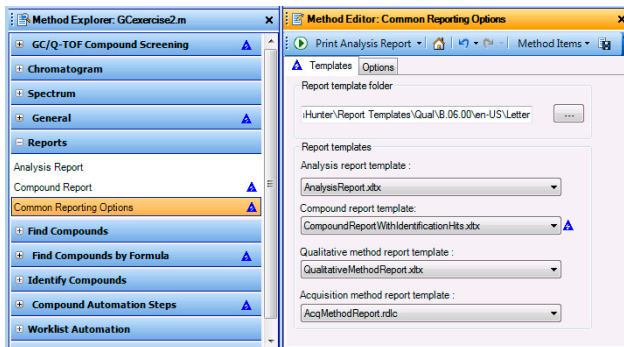


Figura 56 Sezione Common Reporting Options in Method Editor

Excel e Report Designer possono essere utilizzati per personalizzare qualsiasi modello con estensione XLTX. Non è possibile personalizzare il rapporto sul metodo di acquisizione.

3 Utilizzo di workflow, esportazione e stampa

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti

Attività 22. Stampare un rapporto sui composti

Passaggio	Istruzioni dettagliate	Commenti
4 Stampare il rapporto.	<ol style="list-style-type: none">Selezionare File > Print > Compound Report o fare clic sulla freccia dell'icona Print Analysis Report  e selezionare Print Compound Report per stampare il rapporto sui composti.Contrassegnare la casella di controllo Print preview.Fare clic su OK. Esaminare il rapporto.Selezionare l'icona Close Print Preview.	<ul style="list-style-type: none">Nella finestra di dialogo Print Compound Report, è possibile scegliere una stampante diversa, decidere se salvare il file in formata PDF o Excel, scegliere di salvare tutti i risultati o soltanto quelli evidenziati o decidere di combinare più file di dati in un rapporto.Consultare la Guida in linea o il DVD formativo di Report Designer per ulteriori informazioni.

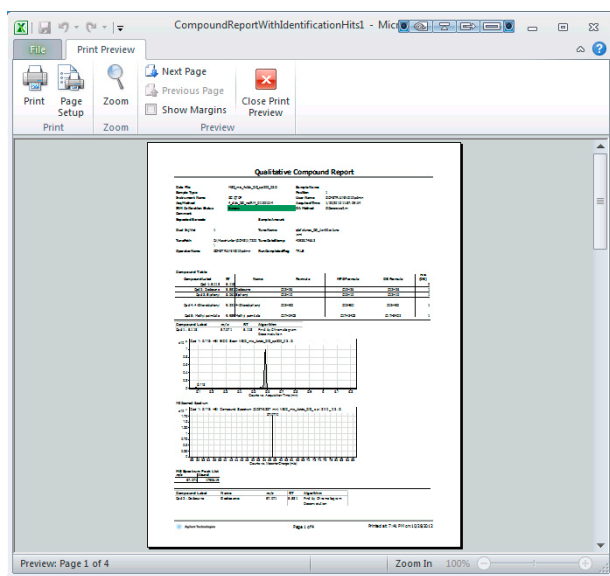
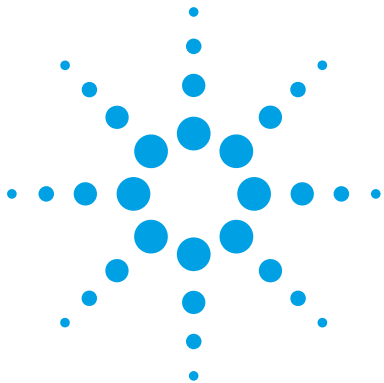


Figura 57 Finestra Print Preview con il rapporto sui composti

- | | |
|--|--|
| 5 Chiudere il file di dati senza salvare i risultati. | <ol style="list-style-type: none">Selezionare File > Close Data File.Selezionare No quando il sistema chiede di salvare i risultati. |
|--|--|



Riferimenti

Utilizzo delle finestre	88
Utilizzo dei risultati di Data Navigator	91
Operazioni sul cromatogramma	92
Operazioni su uno spettro MS o MS/MS	93
Utilizzo dei dati cromatografici visualizzati	94
Utilizzo dei dati sugli spettri visualizzati	95
Workflow	97
Personalizzazione del modello di un rapporto	100



Utilizzo delle finestre

Quando si apre il programma Qualitative Analysis per la prima volta, vengono visualizzate quattro finestre con il loro layout predefinito: Data Navigator, Method Explorer, Chromatogram Results e MS Spectrum Results. È possibile passare dalla finestra Navigator View a Compound Details View.

Utilizzando il menu View è possibile visualizzare altre diciassette finestre in Navigator View:

- Method Editor - consente di modificare i parametri del metodo, in schede distinte
- Spectrum Preview - consente di scansionare rapidamente gli spettri in un file di dati
- MS Spectrum Results - visualizza gli spettri MS e MS/MS
- Difference Results - visualizza i risultati sulla differenza dopo aver eseguito una ricerca nella libreria
- Deconvolution Results - visualizza gli spettri deconvoluti
- Deconvolution Mirror Plot - visualizza due spettri deconvoluti in un'immagine speculare
- UV Spectrum Results - mostra gli spettri UV, disponibili solo per dati LC/MS
- Integration Peak List - visualizza i risultati dell'integrazione in una tabella
- MS Spectrum Peak List 1 - visualizza la tabella del picco per il primo spettro selezionato
- MS Spectrum Peak List 2 - visualizza la tabella del picco per il secondo spettro selezionato
- MS Actuals - visualizza le informazioni sull'acquisizione per lo spettro evidenziato
- Compound List - visualizza i composti individuati mediante uno degli algoritmi Find Compounds
- Compound Identification Results - visualizza le informazioni di identificazione per il composto selezionato
- Spectrum Identification Results - visualizza le informazioni di identificazione per gli spettri selezionati
- MS/MS Formula Details - visualizza una tabella con le formule possibili calcolate per i frammenti trovati in uno spettro MS/MS

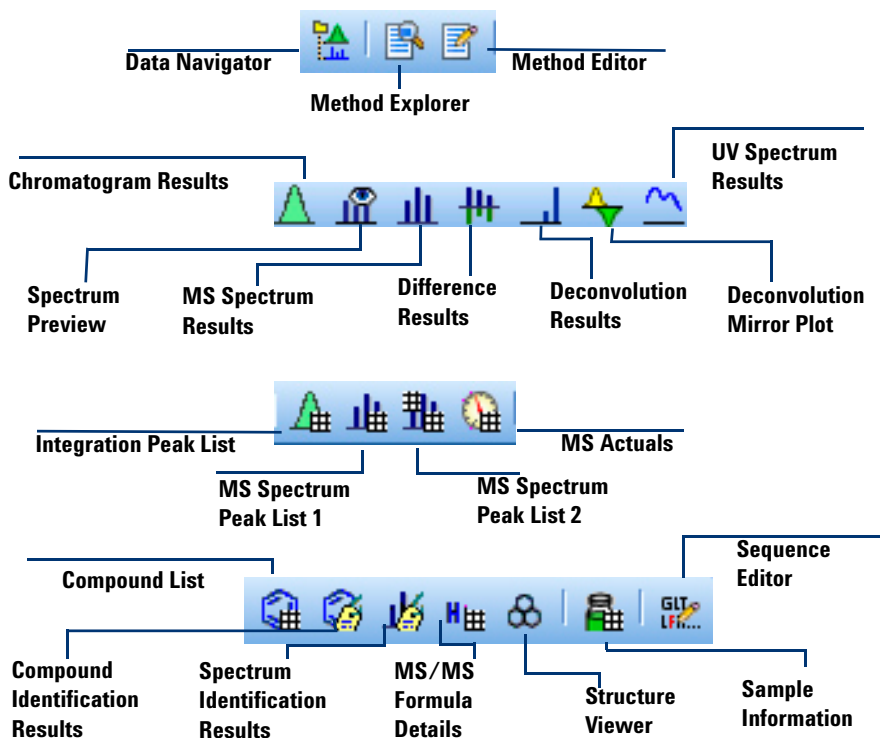
- Structure Viewer - visualizza la struttura associata al composto o allo spettro corrente
- Sample Information - visualizza le informazioni sul file di dati evidenziato
- Sequence Editor - consente di modificare la sequenza di un metodo

È inoltre possibile utilizzare tre finestre degli strumenti visualizzate quando si utilizza il relativo strumento:

- Formula Calculator
- Mass Calculator
- Recalibrate

Icone delle finestre nella barra degli strumenti principali

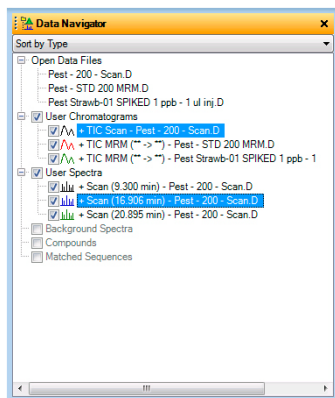
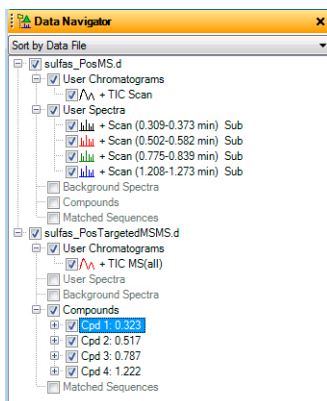
Le finestre vengono aperte e chiuse utilizzando queste icone della barra degli strumenti principale. Sono disponibili altre icone se è installato il software MassHunter BioConfirm. Per aprire queste finestre è possibile utilizzare anche i comandi del menu View.



Utilizzo dei risultati di Data Navigator

Finestra Data Navigator e strumenti

La finestra Data Navigator organizza tutti i risultati dell'estrazione e della selezione dello spettro per file di dati o per tipo di dati.



Icona Linked Navigation

Se la funzione è attiva (opzione predefinita), quando si evidenzia un cromatogramma in Data Navigator vengono contrassegnati anche i relativi spettro. Vengono evidenziati anche i risultati corrispondenti al cromatogramma e all'immagine dello spettro. Linked Navigation funziona soltanto se è stata selezionata la voce Integrate and Extract Peak Spectra dal menu Chromatograms o se è stato utilizzato uno degli algoritmi di Compounds.



Strumenti di segno di spunta

Single check mark – Contrassegna le caselle di tutti i dati evidenziati.

Dual check marks, one gray – Contrassegna le caselle dei dati evidenziati e deseleziona le altre caselle

Dual check marks – Contrassegna tutte le caselle di controllo.

I cromatogrammi e gli spettri vengono visualizzati se le relative caselle di controllo sono selezionate.


Operazioni sul cromatogramma

Utilizzando le voci di menu, è possibile eseguire le seguenti operazioni sull'intero cromatogramma o su una regione di questo:


Azione	Voce menu
Modificare le etichette del picco nel cromatogramma	Configuration > Chromatogram Display Options
Estrarre un cromatogramma	Chromatograms > Extract Chromatograms
Estrarre i cromatogrammi definiti	Chromatograms > Extract Defined Chromatograms
Integrare il cromatogramma	Chromatograms > Integrate Chromatogram
Integrare ed estrarre gli spettri del picco	Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra
Integrare e deconvolvere gli spettri del picco	Chromatograms > Integrate and Deconvolute Peak Spectra
Spianare il cromatogramma	Chromatograms > Smooth Chromatogram
Sottrarre un cromatogramma	Chromatograms > Subtract Any Chromatogram
Calcolare il segnale/rumore	Chromatograms > Calculate Signal-to-Noise
Trovare i composti da dati MS/MS automatici	Find > Find Compounds by Auto MS/MS
Trovare i composti da dati MS/MS specifici	Find > Find Compounds by Targeted MS/MS
Trovare i composti per dati MS(1)	Find > Find Compounds by Molecular Feature
Trovare i composti per dati GC/MS	Find > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution
Trovare i composti per dati MRM	Find > Find Compounds by MRM
Trovare i composti sulla base dei risultati dell'integrazione	Find > Find Compounds by Integration
Trovare i composti adatti alle formule specifiche	Find > Find Compounds by Formula

Selezionare le operazioni sull'intervallo dal menu di scelta rapida

Dopo aver selezionato un intervallo cromatografico, è anche possibile estrarre uno spettro ed estrarre uno spettro su fondo, oltre alle operazioni indicate sopra.

- 1 Per accedere a tali operazioni, selezionare lo strumento Range Select () nella barra degli strumenti Chromatogram Results.
- 2 Selezionare il punto di inizio, trascinare il cursore lungo l'intervallo e rilasciare il pulsante del mouse.
- 3 Fare clic con il tasto destro su un punto qualsiasi del cromatogramma, quindi selezionare l'operazione dal menu di scelta rapida.

Salvare i risultati sul file di dati

- Fare clic sull'icona **Save** () , o selezionare **File > Save Results**.

Quando si esce, il programma chiede se si vuole salvare i risultati sul file di dati (a meno che questa funzione sia stata disattivata nella finestra di dialogo Message Box Options).

Operazioni su uno spettro MS o MS/MS

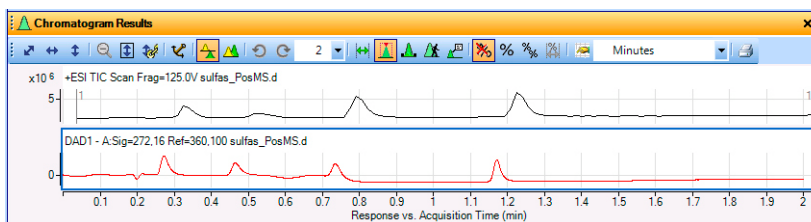
Utilizzando le voci di menu, è possibile eseguire le seguenti operazioni su uno spettro MS o MS/MS o su una regione di questo:

Azione	Voce menu
Visualizzare valore m/z, abbondanza, stato di carica e altre informazioni sui picchi di uno spettro	View > MS Spectrum Peak List 1
Modificare le etichette dei picchi dello spettro	Configuration > MS and MS/MS Spectra Display Options
Sottrarre lo spettro di fondo	Spectra > Subtract Background Spectrum
Sottrarre un qualsiasi spettro	Spectra > Subtract Any Spectrum (e poi selezionare un altro spettro)
Aggiungere due spettri contemporaneamente	Spectra > Add Any Spectrum (e poi selezionare un altro spettro)
Ricerca in un database i valori adatti alle masse specifiche di un spettro	Spectra > Search Database for Spectrum Peaks

Azione	Voce menu
Generare le formule per le masse nell'intervallo selezionato di uno spettro	Spectra > Generate Formulas from Spectrum Peaks (se nello spettro MS è selezionato un intervallo)
Deconvolvere mediante l'algoritmo Resolved Isotope	Spectra > Deconvolute (Resolved Isotope)
Ricerca in una libreria	Identify > Search Library for Spectra o Spectra > Search Library for Spectra

Utilizzo dei dati cromatografici visualizzati

Finestra Chromatogram Results



Strumenti di Chromatogram Results

**Strumenti di ingrandimento/
riduzione in sequenza**



**Strumenti di selezione in
sequenza**



**Uno di questi strumenti è
sempre selezionato.**

Autoscale X-axis e Y-axis

Autoscale X-axis

Autoscale Y-axis

Unzoom

Autoscale Y-axis during Zoom

Linked Y-axis mode

Range Select – Se impostato su **On**, è possibile tracciare un intervallo per il cromatogramma ed eseguire specifiche azioni.

Peak Select – Se impostato su **On**, è possibile selezionare lo spettro di un picco integrato (apex).

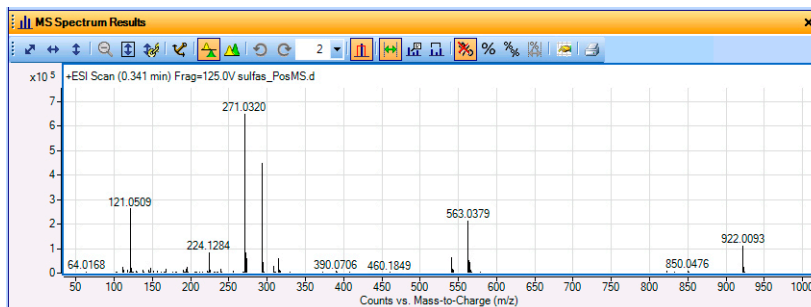
Manual Integration – Se impostato su **On**, è possibile eseguire l'integrazione in modo interattivo.

Walk Chromatogram – Se impostato su **On**, è possibile visualizzare i singoli spettri selezionando ciascun punto oppure utilizzando le freccia sinistra e destra della tastiera.

Annotation – Se impostato su **On**, è possibile aggiungere immagini e testi ai cromatogrammi.

Utilizzo dei dati sugli spettri visualizzati

Finestra MS Spectrum Results



Finestra MS Spectrum Results

Strumenti di ingrandimento/ riduzione in sequenza



Autoscale X-axis e Y-axis

Autoscale X-axis

Autoscale Y-axis

Unzoom

Autoscale Y-axis during Zoom

Linked Y-axis mode

Strumenti di selezione in sequenza



Per deselezionare uno strumento, fare clic su un'altro strumento o un'altra icona.

Range Select – Se impostato su **On**, è possibile tracciare un intervallo per il cromatogramma ed eseguire specifiche azioni

Annotation – Se impostato su **On**, è possibile aggiungere immagini e testi ai cromatogrammi

Calipers – Se impostato su **On**, è possibile aggiungere un calibro Delta Mass allo spettro selezionato. Nella finestra Deconvolution Results, si possono aggiungere un calibro Amino Acid o un calibro Modifications. Consultare il Guida in linea per ulteriori informazioni.

Workflow

Con i workflow è possibile personalizzare l'interfaccia utente dell'applicazione. Ciascun workflow carica un metodo diverso, con parametri adatti per quel tipo di workflow. Inoltre, ciascun workflow carica un layout differente. I layout consentono di personalizzare le colonne di tutte le tabelle. Per finire, quattro tipi di layout offrono una sezione con un editor speciale del metodo che contiene le copie delle sezioni dell'editor del metodo essenziali per quel workflow specifico. Grazie al raggruppamento delle funzioni indispensabili per un certo workflow risulta più semplice personalizzare il metodo.

Nel programma Qualitative Analysis sono disponibili diversi tipi di workflow. Sono:

- General
- BioConfirm - Questi workflow sono disponibili soltanto se è installato il software BioConfirm e se sono contrassegnati nella finestra di dialogo User Interface Configuration. BioConfirm offre vari workflow possibili, a seconda del tipo di analisi da eseguire. BioConfirm è utilizzato con file di dati LC/MS.
- Chromatogram Peak Survey
- Formula Confirmation and Sample Purity
- MS Target Compound Screening
- GC/Q-TOF Compound Screening

Se si utilizzano dati GC/MS, è possibile selezionare il workflow General o il workflow GC/Q-TOF Compound Screening. Se si utilizzano dati LC/MS, è possibile selezionare tutti i workflow ad eccezione di GC-TOF Compound Screening.

Metodo specifico

Ciascun workflow carica un metodo predefinito specifico insieme alle relative impostazioni del workflow. Ad esempio, se si passa ad uno dei workflow di BioConfirm, l'opzione per **Target data type** dell'algoritmo Find Compounds by Molecular Feature viene impostata su **Large molecules (proteins, oligos)**. Questo valore è adatto al workflow BioConfirm ma, per impostazione predefinita, non è accettato dagli altri workflow.

Layout specifico

Ciascun workflow carica inoltre un layout specifico. Un layout definisce:

- La posizione e la dimensione delle finestre
- Le finestre che contengono schede
- Le finestre mobili
- Le finestre con schede in alto
- Le finestre visibili per impostazioni predefinita
- Se la barra di stato è visualizzata

Per ciascuna finestra con tracciato (finestra Chromatogram Results, finestra Spectrum Preview, finestra MS Spectrum Results, finestra Deconvolution e finestra UV Results), il programma salva le seguenti impostazioni:

- Se le immagini vengono sovrapposte o meno
- Se lo strumento Autoscale Y-Axis è attivo o meno durante la modalità Zoom
- Se la modalità Linked Y-Axis è attiva o meno

Per ciascuna tabella, vengono salvate le seguenti impostazioni

- Le colonne visibili
- La sequenza delle colonne
- La larghezza di ciascuna colonna
- I filtri aggiunti alla tabella (solo per la tabella Compound List, la tabella Compound Identification Results e la finestra Spectrum Identification Results).

Sezione specifica in Method Explorer e Method Editor

Utilizzando Method Editor insieme al workflow General è possibile modificare quasi tutti i parametri contenuti in Method.

Gli altri quattro workflow modificano le sezioni disponibili in Method Explorer. Le nuove sezioni contengono solo le schede Method Editor e le sezioni specifiche per quel workflow. Se si modifica un parametro nella sezione del workflow, quel parametro viene modificato anche nella sezione corrispondente delle sezioni generali di Method Editor.

Due schede non vengono ripetute nelle sezioni generali di Method Editor. La sezione **Chromatogram Peak Survey Workflow > Spectrum Peak Identification** e la scheda **Chromatogram Peak Survey Workflow > Chromatogram Extraction > Chromatograms** sono incluse soltanto nel workflow Chromatogram Peak Survey. Queste sezioni influiscono solo sull'algoritmo Chromatogram Peak Survey. Questo algoritmo è utilizzato solo in questo workflow, nell'azione **Chromatogram Peak Survey without Report** e nell'azione **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report**.

Metodi e layout dei workflow

Per ciascun workflow sono disponibili altri metodi e layout predefiniti.

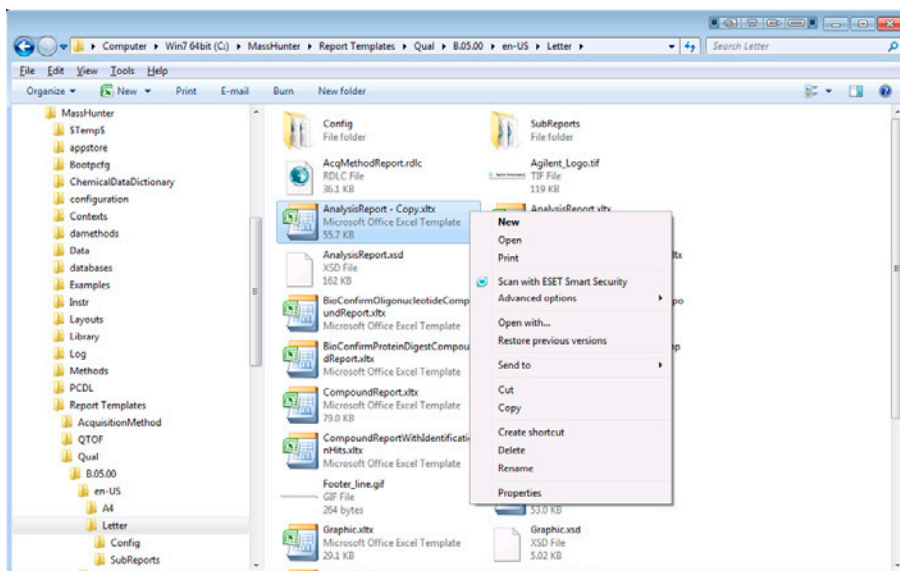
Workflow	Metodo	Layout	Sezione Method Editor
General	default.m	Default.xml	Nessuno
BioConfirm Intact Protein	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm High Mass Intact Protein	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm 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
Formula Confirmation and Sample Purity	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Formula Confirmation and Sample Purity Workflow

Workflow	Metodo	Layout	Sezione Method Editor
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

Personalizzazione del modello di un rapporto

Consultare la Guida in linea di MassHunter Report Designer Add-in, il manuale Report Designer Familiarization Guide o il DVD formativo di Reporting per ulteriori informazioni sulla modifica del modello di un rapporto. I passi seguenti illustrano rapidamente la procedura di personalizzazione di un modello.

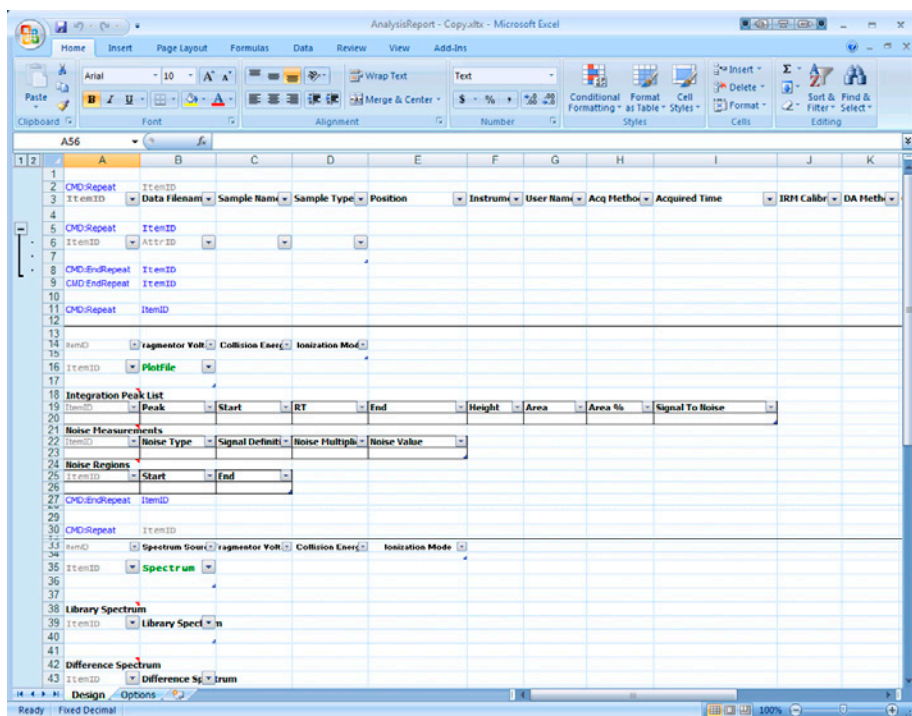
- 1 Selezionare la cartella che contiene i modelli del rapporto. Per impostazione predefinita, la cartella è **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter**. È possibile selezionare una cartella diversa in Method Explorer nella scheda General > Common Reporting Options > Templates.
- 2 Fare una copia del modello da modificare. Selezionare con il tasto la copia e fare clic su **Properties**. Se necessario, deselegionare la casella di controllo **Read-only**. Quindi, fare clic con il tasto destro sulla copia e selezionare **Open** dal menu di scelta rapida.



Se si apre il modello in questo modo, Excel riconosce che si tratta di un file modello. Dopo aver aperto il modello, è possibile modificare le intestazioni e i piè di pagina, aggiungere, rimuovere o spostare le colonne dei parametri. Consultare la Guida in linea per ulteriori informazioni. Tutti i modelli di Qualitative Analysis sono contrassegnati come modelli in sola lettura. È possibile modificare questa proprietà prima di elaborare un modello.

Insieme al programma Qualitative Analysis vengono installati molti modelli. Consultare la Guida in linea di Qualitative Analysis per ulteriori informazioni sul contenuto di ciascun modello del rapporto.

Personalizzazione del modello di un rapporto



3 Apportare le modifiche.

Per ulteriori informazioni sulla modifica di un modello, consultare la Guida in linea di MassHunter Report Designer add-in, o il DVD formativo di *Agilent MassHunter Reporting*.

4 Per salvare un nuovo modello, selezionare **Save** o fare clic su **Save As > Other Formats** dal pulsante Microsoft Office.5 Digitare un nome identificativo, e selezionare **Save**.

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

www.agilent.com

In questo volume

Questa guida contiene informazioni sull'utilizzo del software Agilent MassHunter Workstation - Qualitative Analysis con i dati GC/MS.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Revisione A, Novembre 2012



G3335-94147



Agilent Technologies