

Agilent MassHunter Workstation Software

Análise Qualitativa

**Guia de Familiarização
para GC/MS**



Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Nenhuma parte deste manual pode ser reproduzida de qualquer forma ou por qualquer meio (incluindo armazenamento eletrônico e recuperação ou tradução para um outro idioma) sem o consentimento prévio, por escrito, da Agilent Technologies, Inc. como regido pelas leis de direitos autorais dos EUA e de outros países.

Código do manual

G3335-98147

Edição

Revisão A, novembro de 2012

Impresso nos EUA

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

Microsoft[®], Windows 7[®] e Excel[®] são marcas americanas registradas da Microsoft Corporation nos EUA e/ou em outros países.

Revisão de Software

Este guia é válido para B.06.00 e para revisões posteriores do programa Agilent MassHunter Workstation Software - Análise Qualitativa, até que seja substituído.

Garantia

O material deste documento é fornecido “como está” e está sujeito a alterações sem aviso prévio em edições futuras. Além disso, até onde permitido pelas leis vigentes, a Agilent se isenta de qualquer garantia, seja expressa ou implícita, relacionada a este manual e às informações aqui contidas, incluindo as garantias implícitas de comercialização e adequação a um propósito em particular, mas não se limitando a estas. A Agilent não deve ser responsabilizada por erros ou por danos incidentais ou consequentes relacionados ao suprimento, uso ou desempenho deste documento ou das informações aqui contidas. Caso a Agilent e o usuário tenham um outro acordo por escrito com termos de garantia que cubram o material deste documento e sejam conflitantes com estes termos, devem prevalecer os termos de garantia do acordo em separado.

Licenças de tecnologia

O hardware e/ou o software descritos neste documento são fornecidos com uma licença e podem ser usados ou copiados apenas em conformidade com os termos de tal licença.

Legenda sobre direitos restritos

Direitos restritos do governo dos EUA. Os direitos de software e de dados técnicos concedidos ao governo federal incluem apenas aqueles direitos normalmente concedidos ao usuários finais. A Agilent fornece essa licença comercial costumeira do software e dos dados técnicos conforme a FAR 12.211 (dados técnicos) e 12.212 (software de computador) e, para o Departamento de Defesa, a DFARS 252.227-7015 (dados técnicos – itens comerciais) e DFARS 227.7202-3 (direitos sobre software comercial de computador ou documentação de software de computador).

Avisos de segurança

CUIDADO

CUIDADO indica perigo. Ele chama a atenção para um procedimento, prática ou algo semelhante que, se não forem corretamente realizados ou cumpridos, podem resultar em avarias no produto ou perda de dados importantes. Não prossiga após um aviso de **CUIDADO** até que as condições indicadas sejam completamente compreendidas e atendidas.

AVISO

AVISO indica perigo. Ele chama a atenção para um procedimento, prática ou algo semelhante que, se não forem corretamente realizados ou cumpridos, podem resultar em ferimentos pessoais ou morte. Não prossiga após um **AVISO** até que as condições indicadas sejam completamente compreendidas e atendidas.

Neste guia...

Este guia contém as informações para se aprender a usar o seu Agilent MassHunter Workstation Software - Análise Qualitativa com dados do CG/MS.

Antes de começar a fazer os exercícios, por favor, leia as instruções em “Antes de começar com estes exercícios...” na página 5.

Exercise 1 Aprenda noções de análise qualitativa

Neste exercício, você explorará algumas das muitas poderosas funções do programa de Análise Qualitativa. Estas tarefas são importantes, não importa que tipo de dados você está usando.

Exercise 2 Encontre e Identifique

Nos dois primeiros conjuntos de tarefas, você localiza e identifica medicamentos com baixa concentração de sulfa dentro de uma matriz complexa e gera suas fórmulas para os dados TOF e Q-TOF. Também é possível fazer uma extração de recurso molecular em uma digestão de proteína com os dados TOF e Q-TOF. Estas tarefas também podem ser executadas nos dados Triple Quad.

Exercise 3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Nestas tarefas, você aprende a configurar a executar qualquer método de análise quantitativa. Você também aprende a editar um método para automatizar a análise e/ou identificação do composto. Depois, você executa as ações dentro do método automatizando quando abre um arquivo de dados. Você também aprende a criar um método para executar ações automatizadas com uma lista de trabalho. Cada uma destas tarefas é executada usando um fluxo de trabalho diferente.

Referência

Neste capítulo, você aprenderá noções básicas do programa de Análise Qualitativa.

O Que é Novo

no B.06.00

- Você pode revisar compostos na Visualização de Detalhes do Composto. Quatro janelas adicionais estão disponíveis na Visualização de Detalhes do Composto.
- Quanto à Visualização de Detalhes do Composto, você pode definir diferentes configurações de linha para diferentes tipos de cromatógrafos e espectros.
- O algoritmo Encontrar Compostos por Integração está disponível.
- Você pode procurar em múltiplas bibliotecas por meio do algoritmo de busca de biblioteca e massa de unidade.
- No algoritmo Gerar Fórmulas, você pode selecionar se quer anotar os picos de espectro do fragmento com as fórmulas. A anotação do fragmento seleciona o espectro a ser anotado com base no algoritmo de minagem de composto.
- O algoritmo Gerar Fórmulas pode ser executado em compostos que você encontra por meio do algoritmo Encontrar pela Deconvolução do Cromatógrafo.
- O algoritmo Gerar Fórmula foi modificado para permitir que você insira um número máximo de batidas para cada carregador de carga.
- No algoritmo Gerar Fórmulas, você pode agrupar batidas com a mesma fórmula, mas com carregadores de carga distintos.
- Os compostos podem ser criados a partir de qualquer espectro de usuário. O algoritmo de minagem de compostos para estes compostos é “Extração de Espectro”.
- Quando você estiver salvando resultados com seu arquivo de dados, você pode selecionar se deseja salvar os resultados de todos os compostos com o arquivo de dados ou com um conjunto menor de resultados para cada composto. Todos os cromatogramas de usuário e espectros de usuário são sempre salvos.
- O formato do arquivo CEF foi modificado, de modo que mais informação é incluída.
- O m/z e a informação de espécie de íon estão disponíveis no primeiro nível da tabela de Resultados de Identificação de Espectro.
- A tabela de Identificação de Espectro foi modificada. Você pode adicionar um filtro para uma coluna, e você pode excluir uma fila.

- Você pode agora classificar um pico com Fórmula & Espécie de Íon.
- Alterar o espectro classificado como Melhor na janela Resultados de Identificação de Espectro, quando você tiver um número grande de entradas, é agora um processo significativamente mais rápido.
- Você pode especificar que os cromatogramas de camada sejam sobrepostos no Relatório de Composto.
- O template de relatório da Confirmação de Fórmula padrão foi modificado para incluir a coluna colorida de Marcações (tgt) e a Tabela de Fragmentos com a coluna colorida de Marcações (tgt).

Antes de começar com estes exercícios...

- Instale o software. Consulte o Guia de Instalação para instruções.
- Copie as pastas nomeadas **Dados** de seu disco de instalação em formato descomprimido para qualquer local em seu disco rígido.

Esta pasta contém todos os arquivos de dados necessários para este exercício. Você pode precisar primeiro extrair os arquivos de dados de seu formato .zip.

NOTA

Não reutilize os arquivos de dados de exemplo que já estão em seu sistema, a menos que você saiba que você os copiou dos originais no disco e que você é a única pessoa a utilizá-los. Se os arquivos de dados de exemplo já estão no sistema não coincidem com os originais exatos no disco, então os resultados obtidos durante este exercício não coincidirão com aqueles fornecidos no guia.

Índice

Exercise 1 Aprenda noções de análise qualitativa 9

- Abra o programa Qualitative Analysis 10
- Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS 13
- Tarefa 3. Ampliar ou reduzir a visualização do cromatograma 16
- Tarefa 4. Fixar um cromatograma 17
- Tarefa 5. Modificar layouts de janela 18
- Tarefa 6. Extrair cromatogramas 20
- Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS 22
- Tarefa 8. Calcular valores do sistema de adaptação 27
- Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma 30
- Tarefa 10. Adicionar anotações 40
- Tarefa 11. Adicione um compasso de massa 44

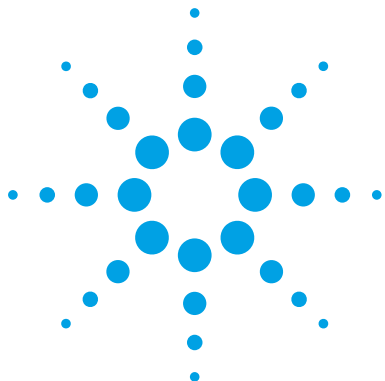
Exercise 2 Encontre e Identifique 47

- Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma 48
- Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library 52
- Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas) 57
- Tarefa 15. Encontre compostos por Integração 61
- Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico 64
- Tarefa 17. Salvar resultados 69

Exercise 3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima 73

- Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral 74
- Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening 79
- Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF 83
- Tarefa 21. Imprima um relatório de análise 85
- Tarefa 22. Imprima um relatório de composto 88

Referência	91
Trabalhe com Janelas	92
Trabalhe com os dados de resultado em Data Navigator	95
Realize operações do cromatograma	96
Realize operações em um espectro MS ou MS/MS	97
Trabalhe com dados visuais cromatográficos	98
Trabalhe com dados visuais espectrais	99
Fluxos de Trabalho	100
Customize uma exibição de relatório	105



1

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Abra o programa Qualitative Analysis	10
Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS	13
Tarefa 3. Ampliar ou reduzir a visualização do cromatograma	16
Tarefa 4. Fixar um cromatograma	17
Tarefa 5. Modificar layouts de janela	18
Tarefa 6. Extrair cromatogramas	20
Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS	22
Tarefa 8. Calcular valores do sistema de adaptação	27
Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma	30
Tarefa 10. Adicionar anotações	40
Tarefa 11. Adicione um compasso de massa	44

Neste exercício, você explorará algumas das muitas potencialidades do programa Qualitative Analysis para trabalhar com dados GC/Q-TOF e GC/QQQ.

Cada exercício é apresentado em uma tabela com três colunas:


- Passos – Use instruções gerais para proceder por conta própria, explorando o programa.
- Instruções Detalhadas – Utilize-as se você precisar de ajuda ou se preferir um processo de aprendizado passo-a-passo.
- Comentário – Leia-os para obter dicas e informação adicional sobre cada passo no exercício.



Abra o programa Qualitative Analysis

Nesta tarefa, você abre múltiplos arquivos de dados utilizando o método atual.

Tarefa 1. Abra o programa Qualitative Analysis com múltiplos arquivos de dados

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Abra o programa Qualitative Analysis.</p> <ul style="list-style-type: none">Abra os arquivos de dados 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 na pasta \\MassHunter\Data ou na pasta para a qual você os copiou.	<p>a Clique duas vezes sobre o ícone Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00 . O sistema exibe a caixa de diálogo Open Data Files.</p> <p>b Vá para a pasta \\MassHunter\Data\GC ou para a pasta onde os arquivos-exemplo estão localizadas.</p>	<ul style="list-style-type: none">O arquivo Pest - 200 - Scan.d contém dados MS e o Pest - STD 200 MRM.d e os arquivos Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d contêm tanto dados MS quanto MS/MS (todos GC/QQQ). MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d contém dados GC/Q-TOF.Você pode obter ajuda para a maior parte das janelas, caixas de diálogo e abas pressionando a tecla F1 quando o teclado estiver ativo.

- Tenha certeza de que o botão **Use current method** foi clicado.
- Tenha certeza de que a caixa de marcação **Load result data** está limpa. Se a caixa de marcação **Load result data** não estiver disponível, então nenhum resultado foi salvo no arquivo de dados. Você aprende a salvar resultados em “[Tarefa 17. Salvar resultados](#)” na página 69 para instruções sobre como salvar resultados.
- Tenha certeza de que a caixa de marcação **Run 'File Open' actions from selected method** está limpa.

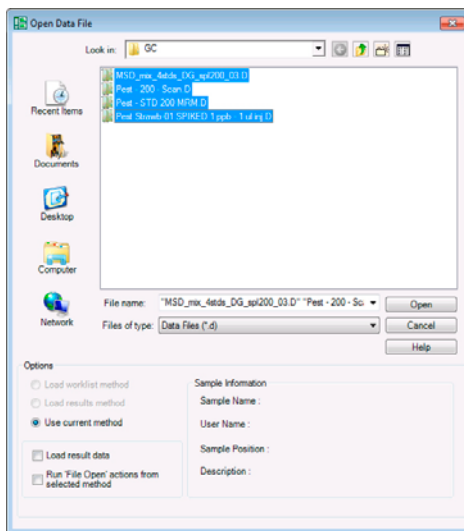



Figura 1 Abra arquivos de dados quando abrir o software

Tarefa 1. Abra o programa Qualitative Analysis com múltiplos arquivos de dados (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
	<p>c Pressione e segure a tecla Shift quando você clicar em 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 Clique em Open. Todos os quator arquivos de dados são exibidos na janela Data Navigator, e de 1 a 3 cromatogramas são exibidos na janela Chromatogram Results.</p> <p>e Clique no ícone List Mode  na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Se você pressionar a tecla Ctrl, você pode escolher arquivos que não estão diretamente próximas uns aos outros na lista. • O que você vê na janela principal, neste momento, depende do método, layout, exibição e configurações de plot que você utilizou antes de abrir estes arquivos. • Quando você clica sobre o ícone List Moe, o plano de fundo do ícone muda para laranja.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Abra o programa Qualitative Analysis

Tarefa 1. Abra o programa Qualitative Analysis com múltiplos arquivos de dados (cont.)

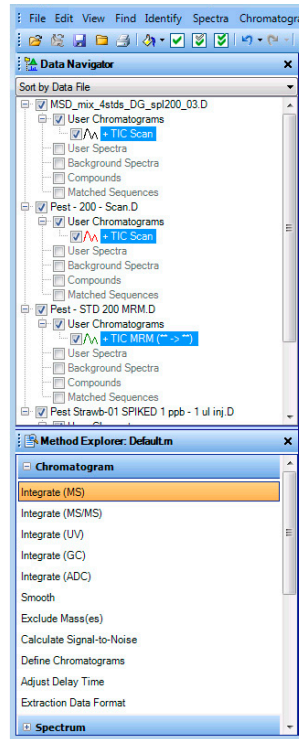
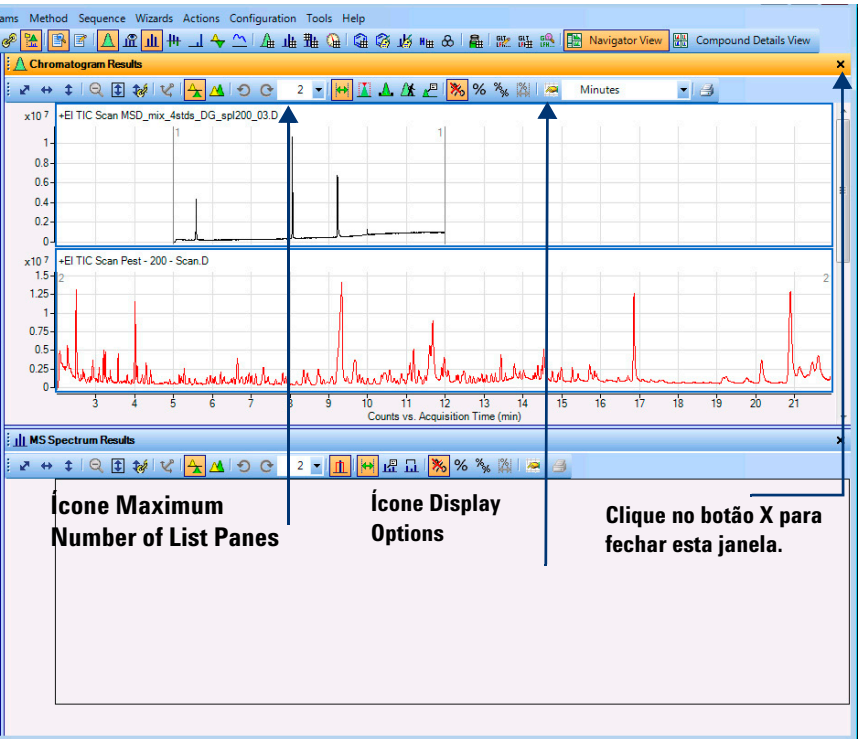


Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
	 <p>Ícone Maximum Number of List Panes</p> <p>Ícone Display Options</p> <p>Clique no botão X para fechar esta janela.</p>	

Figura 2 A janela principal da Qualitative Analysis com o GC/Q-TOF Compound Screening Workflow é carregada.

Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS

Nesta tarefa, você alterna ou para o fluxo Geral (para clientes GC/QQQ) ou para o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening (para clientes GC/Q-TOF). Estes dois fluxos de trabalho são os únicos que aceitam a análise de dados GC/MS. Em seguida, abra a caixa de diálogo User Interface Configuration e marque as caixas de marcação apropriadas para um sistema GC/QQQ ou um sistema GC/Q-TOF.

Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para GC

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Se necessário, abra o programa Qualitative Analysis	<p>a Clique duas vezes sobre o ícone Agilent MassHunter Qualitative Analysis . O sistema exibe a caixa de diálogo Open Data Files.</p> <p>b Clique sobre Cancel na caixa de diálogo Open Data Files.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você pode obter ajuda para a maior parte das janelas, caixas de diálogo e abas pressionando a tecla F1 quando a janela estiver aberta.
2 Alterne ou para General Workflow, ou para GC/Q-TOF Compound Screening Workflow.	<p>a Se você tiver um instrumento GC/QQQ, clique sobre o comando Configuration > Configure for Workflow > General. Se você tiver um instrumento GC/Q-TOF, clique sobre o comando Configuration > Configure for Workflow > GC/Q-TOF Compound Screening.</p> <p>b Clique no botão Load workflow's default method e no botão Load workflow's default layout.</p> <p>c Clique em OK.</p> <p>d Clique no ícone List Mode  na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se o programa Data Acquisition para GC/QQQ ou GC/Q-TOF está instalado no mesmo computador, o software configura a Interface de Usuário automaticamente. A seção GC/Q-TOF Compound Screening pode já estar disponível na janela Method Explorer. Por definição, os cromatogramas estão sobrepostos. Para estes exemplos, os cromatogramas são exibidos em List Mode.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS

Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para GC

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
3 Se você tem um GC/QQQ, configure a interface do usuário para exibir as funções GC/QQQ apenas.	<p>a Clique em Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b Em Separation types, marque apenas a caixa de marcação GC.</p> <p>c Se você tem um instrumento GC/QQQ, então, em tipo de ionização, marque a caixa de marcação El or other "hard" ionization technique e limpe a caixa de marcação CI, APCI, ESI, MADLDI or other "soft" ionization technique.</p> <p>d Sob Mass accuracy, limpe a caixa de marcação Accurate mass (TOF, Q-TOF). Marque as caixas de marcação Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>e Em Optional software features, limpe a caixa de marcação Peptide Sequence Editor e a caixa de marcação BioConfirm Software.</p> <p>f Sob Non-MS detectors, limpe as caixas de marcação UV and ADC.</p> <p>g Marque a caixa de marcação Show advanced parameters.</p> <p>h Clique em OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Você pode alterar quais comandos estão disponíveis na caixa de diálogo User Interface Configuration.• Se uma função não estiver visível, então provavelmente ela está escondida quando uma caixa de marcação User Interface Configuration.

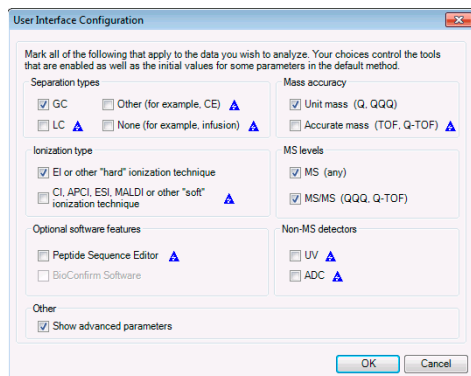


Figura 3 Configurando a interface de usuário para usá-la com dados GC/QQQ.

Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para GC

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>4 Se você tem um instrumento GC/Q-TOF, configure a interface do usuário para exibir funções GC/Q-TOF apenas.</p>	<p>a Clique em Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b Em Separation types, marque apenas a caixa de marcação GC.</p> <p>c Em tipo de ionização, marque ambas as caixas de marcação.</p> <p>d Em MS levels, marque ambas as caixas de marcação.</p> <p>e Sob Mass accuracy, limpe a caixa de marcação Accurate mass (TOF, Q-TOF). Limpe as caixas de marcação Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>f Em Optional software features, limpe a caixa de marcação Peptide Sequence Editor e a caixa de marcação BioConfirm Software.</p> <p>g Sob Non-MS detectors, limpe as caixas de marcação UV and ADC.</p> <p>h Marque a caixa de marcação Show advanced parameters.</p> <p>i Clique em OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode alterar quais comandos estão disponíveis na caixa de diálogo User Interface Configuration. • Se uma função não estiver visível, então provavelmente ela está escondida quando uma caixa de marcação User Interface Configuration.

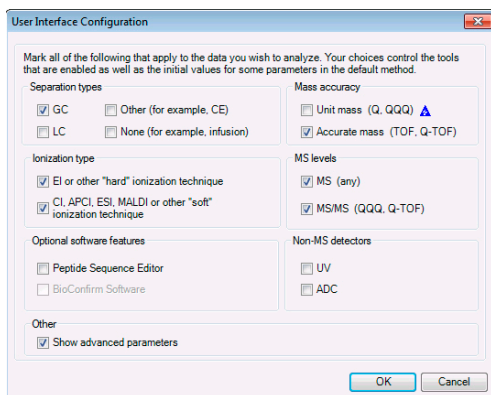


Figura 4 Configurando a interface de usuário para GC/Q-TOF.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 3. Ampliar ou reduzir a visualização do cromatograma

Tarefa 3. Ampliar ou reduzir a visualização do cromatograma

Nesta tarefa, você se familiarizará com as funções de aumentar ou diminuir zoom do programa Qualitative Analysis.

Tarefa 4. Fixar um cromatograma

Nesta tarefa, você fixará um cromatograma. Quando você fixa um cromatograma, o cromatograma fixo permanece constantemente em exibição enquanto você navega pelos outros cromatogramas para exibí-los.

Tarefa 4. Fixar um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<ul style="list-style-type: none"> • Fixar um cromatograma <ul style="list-style-type: none"> • Exibir todos os cromatogramas • Tenha certeza de que a lista de visualização de cromatograma está definida para 1. • Na janela Chromatogram Results, selecione o segundo TIC. • Fixe este TIC. • Navegue pelos cromatogramas. • Limpar a fixação 	<ul style="list-style-type: none"> a Em Data Navigator, marque as caixas de marcação para os cromatogramas que você escondeu na tarefa anterior. b Tenha certeza de que o número máximo de painéis está definido como 1 na janela Chromatogram Results. c Na janela Chromatogram Results, selecione o segundo TIC. d Clique com o botão direito no cromatograma, em seguida, clique em Set Anchor. e Utilize a barra de rolagem na janela Chromatogram Results para navegar pela lista de cromatogramas. O segundo TIC permanece sempre visível, como o primeiro cromatograma. f Clique em Chromatograms > Clear Anchor. 	<ul style="list-style-type: none"> • Quando você define uma fixagem para um cromatograma, um ícone de fixagem aparece na janela do Data Navigator, próximo ao nome do cromatograma fixo. • Dois cromatogramas aparecem na janela Chromatogram Results após você fixar um, mesmo que a lista de visualização indique 1. Isto significa, agora, que você visualiza um cromatograma adicional ao cromatograma fixo. • Você pode também clicar com o botão direito e clicar Clear Anchor no menu do atalho.

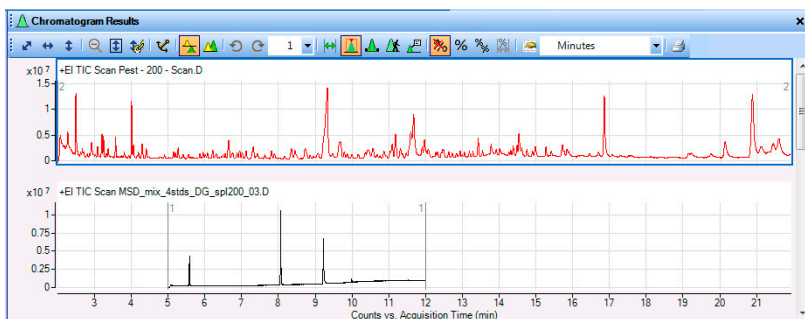


Figura 5 TIC fixo na janela Chromatogram Results

Tarefa 5. Modificar layouts de janela

Nesta tarefa, você move as janelas na visualização principal e cria vários layouts de janelas.

Tarefa 5. Modificar layouts de janela

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Modifique o layout de janela:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modifique o tamanho da janela. • Salve o layout da janela. • Desbloqueie o layout. • Modifique a janela Chromatogram Results para que ela flutue. • Mova a janela Chromatogram Results. • Exiba as ferramentas para o reposicionamento das janelas. 	<ul style="list-style-type: none"> • Para modificar o tamanho de uma janela, arraste a fronteira entre janelas. • Para salvar um layout de janela, clique em Configuration > Window Layouts > Save Layout. • Para desbloquear um layout de janela, clique em Configuration > Window Layouts > Lock Layout. • Para fazer uma janela flutuar, clique com o botão direito sobre a janela, em seguida, clique em Floating no menu de atalhos. • Para mover uma janela, clique na barra de título da janela e arraste-a para o local desejado. • Para exibir as ferramentas de reposicionamento, arraste a janela sobre uma das outras janelas. Quando a janela estiver sobrepondo uma segunda, o programa exibirá várias ferramentas de layout, como exibidas em Figura 6. 	<ul style="list-style-type: none"> • Se o layout estiver desbloqueado, o sistema não exibirá uma marca de checagem ao lado do menu Lock Layout. • Você pode usar apenas as ferramentas de reposicionamento quando o layout estiver desbloqueado. • Você também pode fazer uma janela flutuar clicando duas vezes sobre a barra título da janela. • O software tem muitos layouts diferentes criados. Você também pode tentar criar layouts diferentes. • O software tem diferentes fluxos de trabalho. Cada fluxo de trabalho carrega um layout diferente. Alterar para um fluxo de trabalho diferente também modifica o layout.

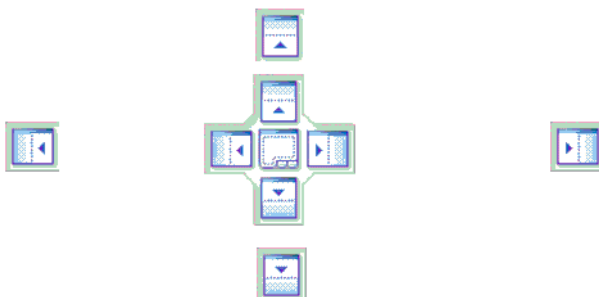


Figura 6 Ferramentas de reposicionamento de janela.

Tarefa 5. Modificar layouts de janela (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>2 Reposicionamento na janela Chromatogram Results.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Mova a janela de modo que ela permaneça ao topo, à esquerda, à direita e, em seguida, na parte inferior da janela. • Mova duas janelas conjuntamente de modo que uma esteja ao topo da outra e disponível apenas por meio de abas na parte inferior. • Recupere o layout padrão. 	<ul style="list-style-type: none"> • Se você arrastar o cursor sobre um dos ícones menores, a janela que você está arrastando será posicionada acima, à direita, abaixo ou à esquerda de todas as outras janelas. • Arraste o cursor sobre o ícone maior. A janela pode também ser posicionada acima, à direita, abaixo ou à esquerda de uma outra janela arrastando o cursor sobre as bordas de um ícone maior. • Para agrupar duas janelas juntas, arraste o cursor sobre o centro do ícone maior. Você verá uma versão sombreada das duas janelas agrupadas. Pare de arrastar o mouse. AS duas janelas serão colocadas conjuntamente em abas. • Clique em Configuration > Window Layouts > Restore Default Layout. 	<ul style="list-style-type: none"> • O cursor deve estar sobre uma das setas em uma caixa, para que o reposicionamento aconteça. • Clicar sobre o comando Restore Default Layout restaura o layout que é utilizado pelo fluxo de trabalho General e pelo fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening. Se você está usando um fluxo de trabalho diferente, você precisa carregar o layout que é usado para este fluxo de trabalho.

Tarefa 6. Extrair cromatogramas

Nesta tarefa, você extrai e funde os cromatogramas do TIC original.

Tarefa 6. Extrair cromatogramas

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Extraia e funda os cromatogramas de íon extraídos (EICs) de duas massas no arquivo de dados Pest - 200 Scan.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> Os valores m/z são 129.0 e 414.2. Não funda os picos de massas individuais em um cromatograma. 	<p>a Na janela Data Navigator, limpe as caixas de marcação dos arquivos de dados exceto por Pest - 200 Scan.d.</p> <p>b Abra a caixa de diálogo Extract Chromatograms, usando a opção abaixo ou uma das opções à direita:</p> <ul style="list-style-type: none"> Clique em Chromatograms > Extract Chromatograms. <p>c Em List of opened data files, clique em Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>d Na caixa de lista Type, selecione EIC.</p> <p>e No campo m/z value(s), digite 129.0, 414.2</p> <p>f Se necessário, limpe a caixa de checagem Merge multiple masses into one chromatogram para fundir os EICs.</p> <p>g Clique em OK.</p> <p>h Defina Maximum number of list panes para 3 na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você pode também extrair cromatogramas de uma das seguintes maneiras: <ul style="list-style-type: none"> Clique com o botão direito no cromatograma e clique em Extract Chromatograms. Partindo de Data Navigator, selecione TIC Scan para sulfas_PosMS.d, em seguida, clique com o botão direito sobre TIC Scan e clique em Extract Chromatograms. Você pode utilizar o nível do MS ou All ou MS. Observe que você também pode escolher fazer com que o cromatograma extraído automaticamente seja integrado após a extração. Você também pode extrair um cromatograma partindo de um espectro de massa.

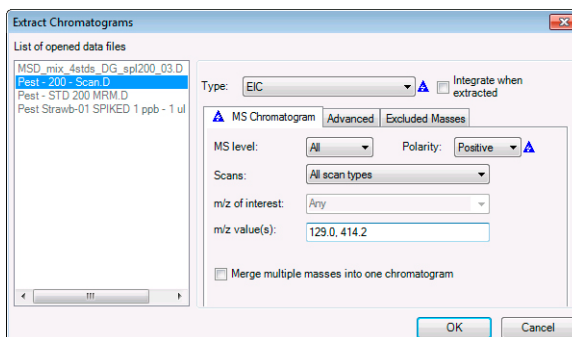


Figura 7 A caixa de diálogo Extract Chromatograms

Tarefa 6. Extrair cromatogramas (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

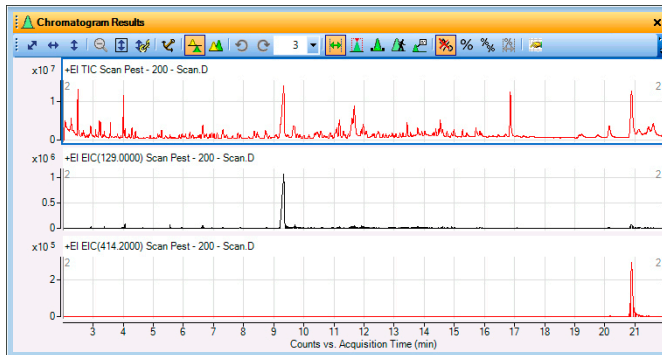


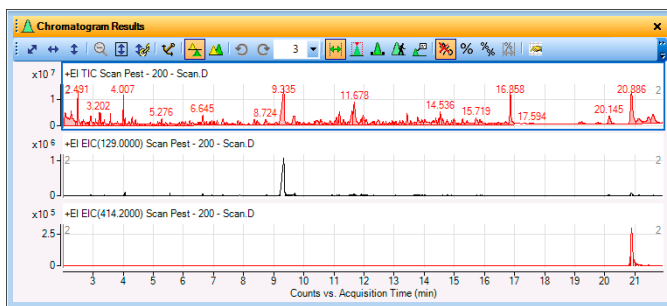
Figura 8 Cromatogramas de íon extraídos fundidos (EICs) comparados ao TIC original

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS

Nesta tarefa, você aprende modos diferentes de se integrar um cromatograma, altere os parâmetros de integração para modificar os resultados e calcular a relação Sinal-Ruído para os picos integrados para dados MS/MS.

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
1	<p>Integre o arquivo de dados TIC Scan chromatogram for the Pest - 200 - Scan.d, utilizando qualquer uma das opções listadas abaixo.</p> <p>a Marque o arquivo de dados Pest - 200 - Scan.D na janela Data Navigator.</p> <p>b Selecione o cromatograma TIC Scan e utilize um dos seguintes comandos:</p> <ul style="list-style-type: none"> A partir da barra de menu, clique em Chromatograms > Integrate Chromatogram. Clique com o botão direito em qualquer lugar na janela de cromatograma, e clique em Integrate Chromatogram. Na janela Data Navigator, selecione Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms > TIC Scan, em seguida, clique com o botão direito em TIC Scan e clique em Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> Observe que o programa integrou praticamente todos os picos no cromatograma. Selecione o integrador a ser usado para os dados de MS, dados de MS/MS e dados de GC na janela Method Editor. O cromatograma é um cromatograma MS, de modo que os valores que são definidos na seção Integrate (MS) do Method Editor são usados quando se integra o cromatograma.
2	<p>Exiba apenas dois cromatogramas ao mesmo tempo.</p> <p>• Selecione 2 da caixa Maximum number of list panes na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p>	



Muitos picos pequenos são integrados.

Figura 9 TIC Scan Chromatogram integrado com muitos picos pequenos.

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>3 Modifique o limite para integrar picos menores.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modifique o limite para reter apenas três picos maiores. 	<p>a A partir da janela Method Explorer, clique Chromatogram > Integrate (MS) para exibir a aba Integrate (MS).</p> <p>b Selecione o integrador Agile.</p> <p>c Clique na aba Peak Filters.</p> <p>d Sob Maximum number of peaks, marque Limit (by height) to the largest, e digite 3.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Observe o triângulo azul que aparece quando você modifica a configuração do valor salvo para o método atual. Quando você salvar o método, os triângulos desaparecem.

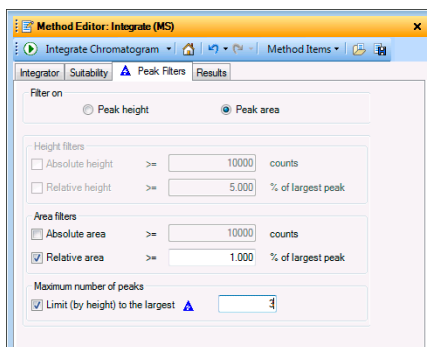



Figura 10 Aba Peak Filters com **Limit (by height) to the largest** marcado.

<p>4 Reintegrar o cromatograma</p>	<p>e Clique sobre o botão  na barra de ferramentas do Method Editor para integrá-lo utilizando a nova configuração.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Observe que apenas os três principais picos estão agora integrados. • O pico em 2.491 tem uma altura superior ao pico em 16.858 minutos, de modo que o pico selecionado é o terceiro.
---	---	--

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

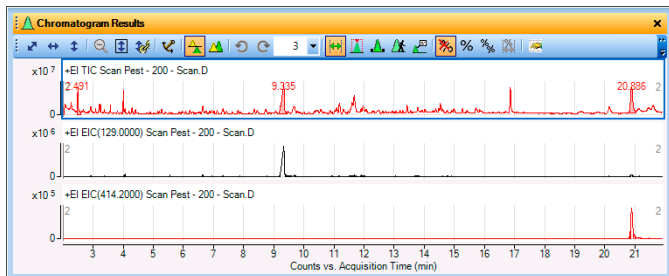


Figura 11 O cromatograma integrado TIC Scan quando se limita o número de picos.

- | | | |
|---|---|---|
| 5 Integre o cromatograma TIC MRM para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.D . | <p>a Na janela Data Navigator, selecione TIC MRM para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>b Utilize um dos seguintes comandos para integrar os cromatogramas.</p> <ul style="list-style-type: none">• A partir da barra de menu, clique em Chromatograms > Integrate Chromatogram.• Clique com o botão direito em qualquer lugar na janela de cromatograma, e clique em Integrate Chromatogram.• Na janela Data Navigator, clique com o botão direito no cromatograma destacado e clique em Integrate Chromatogram. <p>c Aumente a visualização de 5.8 para 8.5 minutos.</p> <p>d Defina o Maximum number of list panes para 2.</p> | <ul style="list-style-type: none">• Pressione a tecla Ctrl para destacar mais do que um cromatograma na janela Data Navigator.• Observe que o programa integrou praticamente todos os picos no cromatograma.• Estes cromatogramas são cromatogramas MS/MS, portanto, os valores que são definidos na seção Integrate (MS/MS) da janela Method Editor são usadas quando se utiliza a integração do cromatograma. Você pode selecionar um integrador a ser utilizado para se integrar os cromatogramas MS e um integrador diferente, para ser usado na integração dos cromatogramas MS/MS. |
|---|---|---|

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

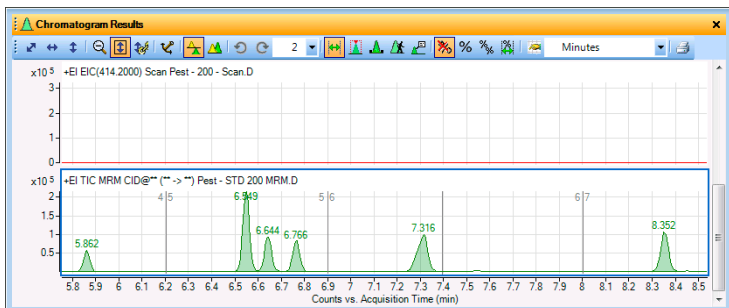


Figura 12 Cromatogramas MRM integrados

6 Selecione o integrador **MS/MS (GC)**. Modifique o filtro para aceitar apenas picos com uma altura absoluta maior ou igual a 20,000.

- a Na janela do Method Explorer, selecione **Chromatogram > Integrate (MS/MS)**.
- b Selecione **MS/MS (GC)** como **Integrator**.
- c Clique na aba **Peak Filters**.
- d Sob **Filter on**, clique em **Peak height**.
- e Sob **Height filters**, marque a caixa de seleção **Absolute height**.
- f Digite 60000 como **Absolute height**.

- Observe o triângulo azul que aparece quando você modifica a configuração do valor salvo para o método atual. Quando você salvar o método, os triângulos desaparecem.

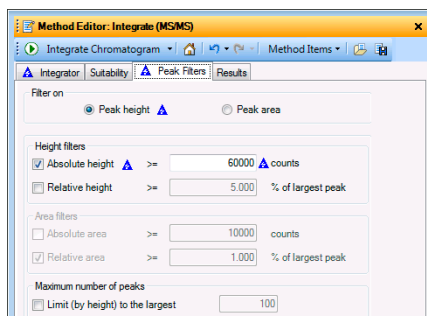


Figura 13 Aba Peak Filters com **Absolute height** marcado

7 Reintegrar o cromatograma

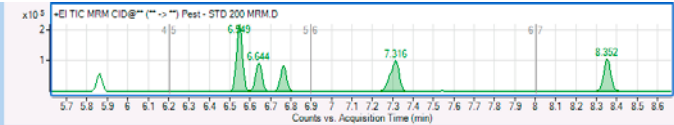



- g Clique no botão  na barra de ferramentas Method Editor.

- Observe que apenas os picos maiores estão agora integrados.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS

Tarefa 7. Integre interativamente um cromatograma GC/MS (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
	<p>O menor pico a 5.8 minutos não está incluído mais nos resultados de integração porque a altura absoluta para este pico é inferior a 6.000 contagens.</p>	
Figura 14 Cromatogramas TIC e EIC MS/MS integrados com um limite mais alto.		
8 Restaure as configurações que estão salvas no método atual e feche o Method Editor.	<ul style="list-style-type: none">a Selecione a seção Chromatogram > Integrate (MS/MS) no Method Explorer.b Clique sobre o ícone  no Method Editor.c Selecione a seção Chromatogram > Integrate (MS) no Method Explorer.d Clique sobre o ícone  no Method Editor.e Feche a janela Method Editor.	<ul style="list-style-type: none">• Para cancelar suas modificações e restaurar os valores do método carregado, clique no ícone Restore to last saved values from file  na barra de ferramentas Method Editor.
9 Exclua todos os cromatogramas, exceto o original. Exclua os resultados da integração do cromatograma original.	<ul style="list-style-type: none">a Sob User Chromatograms, na janela Data Navigator, selecione todos os cromatogramas, exceto o original.b Clique com o botão direito sobre os cromatogramas, e clique em Delete.c Selecione todos os cromatogramas TIC.d Clique em Chromatograms > Clear Results.	<ul style="list-style-type: none">• Quando você utilizar o comando Clear Results, os cromatogramas não serão excluídos; os resultados que são conectados aos cromatogramas serão removidos. Neste caso, os valores de integração serão limpos.

Tarefa 8. Calcular valores do sistema de adaptação

Nesta tarefa, você aprende modos diferentes de se integrar um cromatograma, altere os parâmetros de integração para modificar os resultados e calcular a relação Sinal-Ruído para cada pico. Você também aprende como habilitar os cálculos do Sistema de Adaptação.

Tarefa 8. Integre interativamente um cromatograma (MS)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Integre o cromatograma MSD_mix_4stds_DBSpl200_03.d e Pest - 200 - Scan.d utilizando qualquer uma das opções listadas à direita.</p>	<p>a Marque a caixa de marcação próxima aos arquivos de dados MSD_mix_4stds_DG_Spl200_03.d na janela Data Navigator.</p> <p>b Marque as caixas de marcação próximas ao arquivo de dados Pest - 200 - Scan.D na janela Data Navigator.</p> <p>c Destaque ambos os TICs.</p> <p>d Integre a TIC Scan para ambos os arquivos, utilizando qualquer uma das seguintes opções.</p> <ul style="list-style-type: none"> • A partir do menu principal, clique em Chromatograms > Integrate Chromatogram. • Destaque o cromatograma. Em seguida, clique com o botão direito no cromatograma e clique em Integrate Chromatogram. • No Data Navigator, destaque TIC Scan para ambos os arquivos de dados. Em seguida, clique com o botão direito sobre o cromatograma e clique em Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> • Para o fluxo de trabalho Geral, a integração utiliza o General Integrator, porque este foi o integrador selecionado no método default.m. Para o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening, a integração utiliza o Agile Integrator. • Você pode modificar este valor na aba Chromatogram > Integrate (MS) > Integrator. • Observe que a integração com parâmetros padrão detecta picos muito pequenos.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 8. Calcular valores do sistema de adaptação

Tarefa 8. Integre interativamente um cromatograma (MS) (cont.)

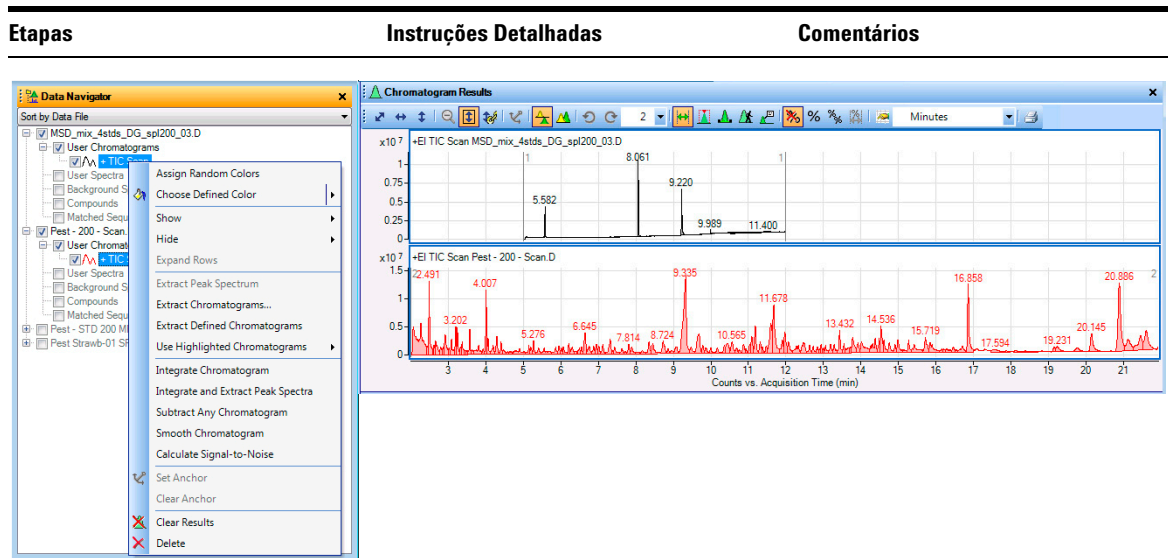
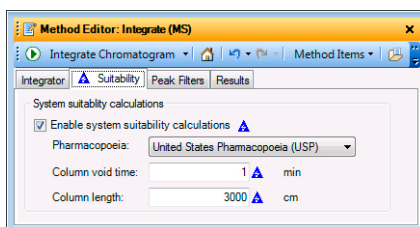


Figura 15 Um dos menus de atalho no Data Navigator e os cromatogramas integrados

- 2 Habilitar cálculos de adaptabilidade do sistema para os cromatogramas do MS.
- a Em Method Explorer, clique **Chromatogram > Integrate (MS)** para exibir a aba Integrate.
 - b Clique na aba **Suitability**.
 - c Marque **Enable system suitability calculations**.
 - d Selecione **United States Pharmacopoeia (USP)**.
 - e Na caixa **Column void time**, tipo 1.
 - f Na caixa **Column length** tipo 3000.
- Observe o triângulo azul que aparece quando você modifica a configuração do valor salvo para o método atual. Quando você salvar o método, os triângulos desaparecem.
 - Os algoritmos que são usados para definir várias colunas na Integration Peak List mudam, dependendo da farmacopeia selecionada. Consulte a Ajuda online para mais informações.



O tempo de espera da coluna e a espessura da coluna para estes arquivos de dados é diferente destes valores. Estes são usados apenas para este exemplo.

Figura 16 Aba Chromatogram > Integrate (MS) Suitability

Tarefa 8. Integre interativamente um cromatograma (MS) (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
3 Reintegrar o cromatograma.	<ul style="list-style-type: none"> • Clique no ícone Integrate Chromatogram na barra de ferramentas Method Editor para realizar a integração com a nova configuração. 	
4 Visualize os cálculos de adaptabilidade do sistema. <ul style="list-style-type: none"> • Abra a janela Integration Peak List. • Reveja os valores para a região de ruído e calcule a razão sinal-ruído para picos integrados. 	<ul style="list-style-type: none"> a Clique em View > Integration Peak List. b Clique com o botão direito no cabeçalho da janela Peaks e clique em Floating. c Clique com o botão direito no cabeçalho de qualquer coluna que você não queira ver e clique em Remove Column. d Clique com o botão direito em qualquer cabeçalho de coluna e clique em Add/Remove Columns para modificar as colunas visíveis. 	<ul style="list-style-type: none"> • Os cálculos de adaptabilidade do sistema são incluídos na tabela Integration Peak List. • Estes valores incluem k', Tailing factor, Plates, Plates/M e Symmetry. • Você também pode habilitar os cálculos de adaptabilidade de sistema para um MS, um MS/MS e um cromatograma GC.

Peak	RT	Area	Height	Width	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.582	3333448.49	3945598.34	0.032	1	4.6	1059692	35323.1	514.7	1
2	8.061	9681480.76	10226836.53	0.081	0.8	7.1	1912708	63756.9	110.2	1.1
3	9.22	7942683.71	6210356.23	0.097	0.5	8.2	1697500	56583.3	44.9	2
4	9.989	510635.36	513381.88	0.06	0.8	9	3265567	108852.2	30.5	2
5	11.4	7358659.58	122897.42	1.216	0.43	10.4	473932	15797.7	31.9	1.7

Figura 17 A tabela Integrated Peaks com valores de adaptabilidade do sistema.

5 Restaure as configurações para o método padrão e feche a janela Method Editor e a janela Integration Peak List.	<ul style="list-style-type: none"> a Para cancelar suas modificações e restaurar os valores do método padrão, clique no ícone Restore to last saved values from file na barra de ferramentas Method Editor. b Feche a janela Method Editor. c Clique com o botão direito no cabeçalho da janela Peak List e clique em Floating. d Clique em View > Integration Peak List. 	<ul style="list-style-type: none"> • Quando você clica no comando Floating no menu de atalhos pela segunda vez, a janela Integration Peak List volta para o local onde estava anteriormente.
--	--	---



1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Nesta tarefa, você extrai um espectro exatamente de onde você especificou no cromatograma. O programa Qualitative Analysis extrai um espectro de um ponto de dados específico ou extrai um espectro médio de uma média de múltiplos pontos de dados ou amplitudes.

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Navegue em um cromatograma para visualizar o íon precursor e o íon-produto dos últimos picos de Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Aumente a visualização na região entre 13 e 16 minutos.• Utilize o ícone Walk Chromatogram.• Reveja os espectros começando a cerca de 13 minutos e, em seguida, mova a seta para a direita.	<p>a Marque a linha Pest - 200 - MRM.D na janela Data Navigator.</p> <p>b Feche a janela do Method Editor.</p> <p>c Feche a janela MS Spectrum Results.</p> <p>d Clique o cromatograma TIC MRM na janela Data Navigator.</p> <p>e Clique no ícone Autoscale Y-axis during Zoom  na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>f Selecione 1 para Maximum number of list panes.</p> <p>g Para aumentar a visualização em alguns picos, clique com o botão direito do mouse sobre o pico a 13 minutos e arraste-o até 16 minutos, em seguida, solte-o.</p> <p>h Clique no ícone Walk Chromatogram  na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>i Mova o cursor Walk Chromatogram sobre o eixo-X até cerca de 13 minutos, em seguida, clique.</p> <p>j Para navegar de espectro a espectro, utilize as setas direita e esquerda de seu teclado.</p>	<ul style="list-style-type: none">• A ferramenta Walk Chromatogram é particularmente útil em dados MS/MS para a identificação de íons precursores e produtos.• O espectro de cada ponto que você seleciona na janela Chromatogram Results é automaticamente exibido na janela Spectrum Preview, que é aberta automaticamente.• Às vezes, dois espectros são exibidos na janela Spectrum Preview. Por exemplo, dois espectros são exibidos na janela Spectrum Preview para cada ponto que você clica próximo ao pico de 13.431 minutos.

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

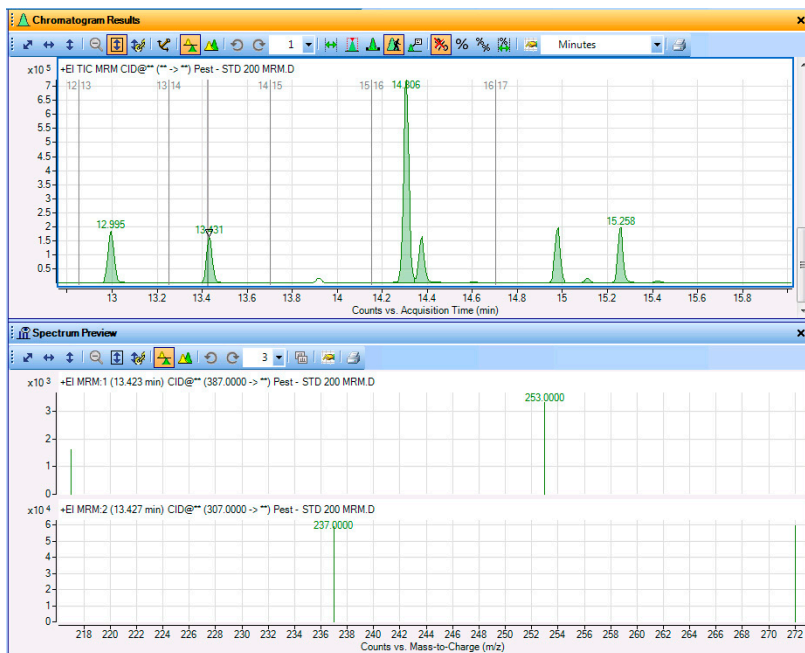






Figura 18 Navegue pelo cromatograma para visualizar dois espectros MRM para o pico em 13.43 minutos

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>2 Extraia espectros em pontos de dados específicos para o pico a 5.2 minutos e para o pico a 14.3 minutos do arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Extraia um espectro do pico ou próximo a 5.2 minutos e, em seguida, um dos vales, utilizando qualquer uma das opções descritas em Comentários.• Extraia um espectro do pico ou próximo a 14.3 minutos. (ainda não no vale)• Modifique a exibição para mostrar pelo menos três espectros.	<p>a Clique no ícone Range Select  da barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>b Feche a janela Spectrum Preview.</p> <p>c Clique no ícone Zoom Out, , na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>d Para aumentar o zoom para o pico de 5.2 minutos, clique com o botão direito do mouse sobre o pico a 4.0 minutos e arraste-o para 6.0 minutos, em seguida, libere-o.</p> <p>e Em um pico próximo de 5.2 minutos, extraia um espectro de qualquer uma das formas listadas na coluna Comentários.</p> <p>f Em um vale próximo a 5.1 minutos, extraia o espectro.</p> <p>g Clique no ícone Zoom Out, , na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>h Aumente o zoom na região entre 14 e 15 minutos.</p> <p>i Em um pico próximo de 5.2 minutos, extraia um espectro de qualquer uma das formas listadas na coluna Comments. (Não extraia o espectro do vale ainda.)</p> <p>j Se necessário, selecione 4 no ícone Maximum number of list panes na barra de ferramentas MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Quando você aumenta o zoom, tenha certeza de que o ícone AutoScale Y-axis during Zoom,  está "ligado". O plano de fundo do ícone é laranja, quando ele está ligado.• Você pode também extrair um espectro de uma das seguintes maneiras:<ul style="list-style-type: none">• Clique duas vezes sobre o ponto de dados do cromatograma.• Clique sobre o ponto de dados do cromatograma, em seguida, clique com o botão direito em qualquer parte do cromatograma. Clique em Extract MS Spectrum. A caixa de diálogo Extract Spectrum é exibida. Tenha certeza de que o arquivo Pest - STD 200 MRM.d está selecionado e clique em Extract na caixa de diálogo Extract Spectrum.• Observe que quando você extrai um espectro pela primeira vez, a janela MS Spectrum Results aparece contendo o espectro, o tipo de espectro e o tempo de retenção aparece sob Espectros de Usuário. Todos os espectros extraídos aparecem em ambos os lugares.• Quando você extrai um espectro do MS a partir do pico próximo a 14.3 minutos, dois espectros são extraídos porque duas transições acontecem durante o pico.

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas

Instruções Detalhadas

Comentários

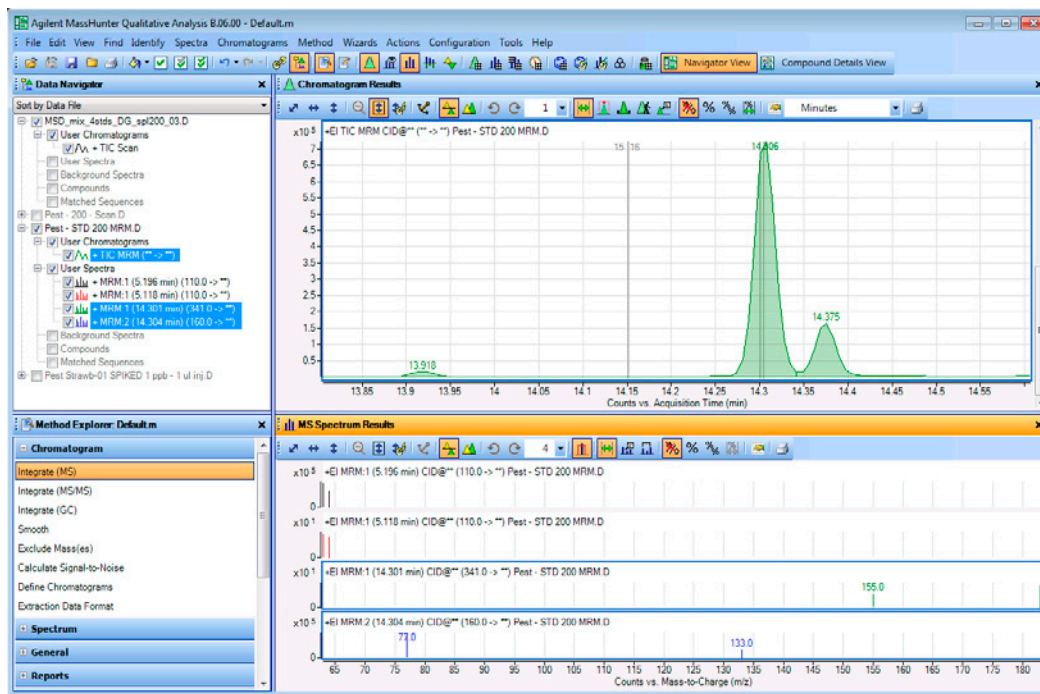



Figura 19 A janela principal com dois espectros MRM do pico a 5.2 minutos e dois espectros MRM do pico a 14.3 minutos.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>3 Extraia um Espectro MS do vale a 14.35 minutos do arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Faça a Pré-visualização de Espectro • Extraia um espectro do vale o próximo a 14.3 minutos do RT. • Copie o espectro para a pasta User Spectra. • Modifique a exibição para mostrar 6 espectros. • Desligue a Pré-visualização de Espectro. 	<p>a Clique sobre o ícone Spectrum Preview, .</p> <p>b Em um vale próximo a 14.3 minutos, extraia um espectro.</p> <p>c Clique com o botão direito sobre o espectro na janela Spectrum Preview e clique em Copy to User Spectra. Os espectros são copiados para a sessão User Spectra em Data Navigator, e são exibidos na janela MS Spectrum Results.</p> <p>d Clique com a seta para baixo próxima à lista de painel de espectros e selecione 6.</p> <p>e Feche a janela Spectrum Preview.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Quando Spectrum Preview está habilitado, o sistema exibe qualquer espectro selecionado manualmente na janela Spectrum Preview, mas não na seção User Spectra do Data Navigator. • Quando Spectrum Preview está ligado, a Qualitative Analysis sobrescreve o espectro anterior quando você extrai um novo espectro. • O modo Specter Preview é útil quando você quer rapidamente revisar os espectros em seu cromatograma e salvar apenas alguns dos espectros.

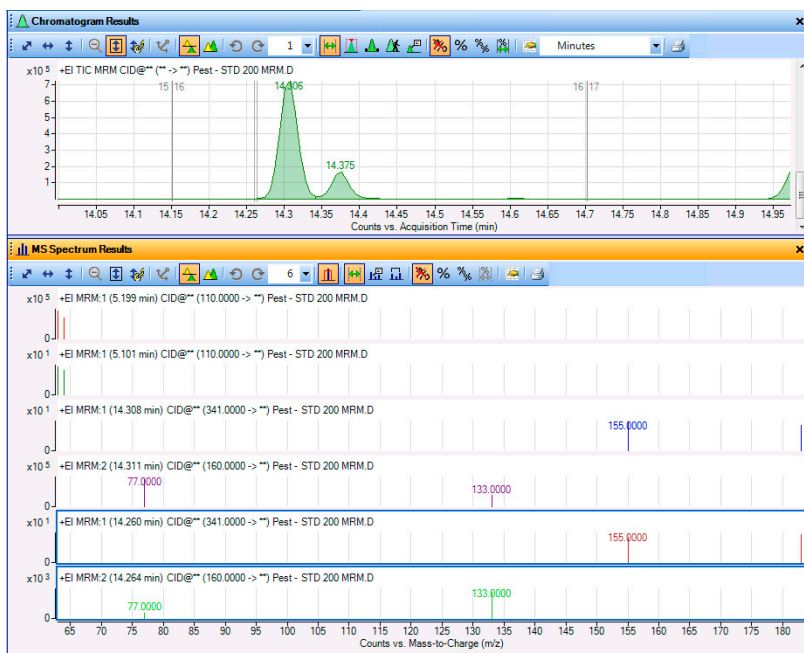



Figura 20 Resultados do Cromatograma e janela MS Spectrum Results

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>4 Extraia um espectro que tenha a média de todos os pontos em uma amplitude especificada para o pico em 14.3 minutos para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Menos zoom. • Clique no ícone Range Select da barra de ferramentas Chromatogram. • Defina uma amplitude para todo o pico. • Extraia o espectro, utilizando qualquer uma das opções listadas. 	<p>a Clique sobre o ícone Range Select  na barra de ferramentas do Cromatograma.</p> <p>b Clique no lado esquerdo da base do pico a 14.3 minutos e arraste-o para a base do pico à direita.</p> <p>c Extraia a média do espectro utilizando uma das opções à direita.</p> <p>d Selecione 2 na caixa Maximum number of list panes, na janela MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode extrair um espectro médio clicando duas vezes sobre a amplitude selecionada no cromatograma. • Ou clique com o botão direito sobre o cromatograma e, em seguida, clique em Extract MS Spectrum no menu de atalho. • Observe que dois espectros de MRM com média aparecem.

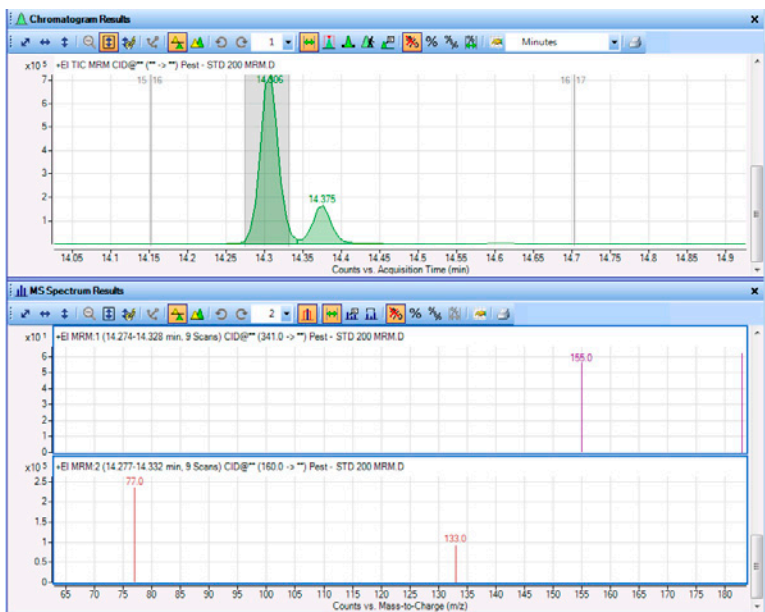


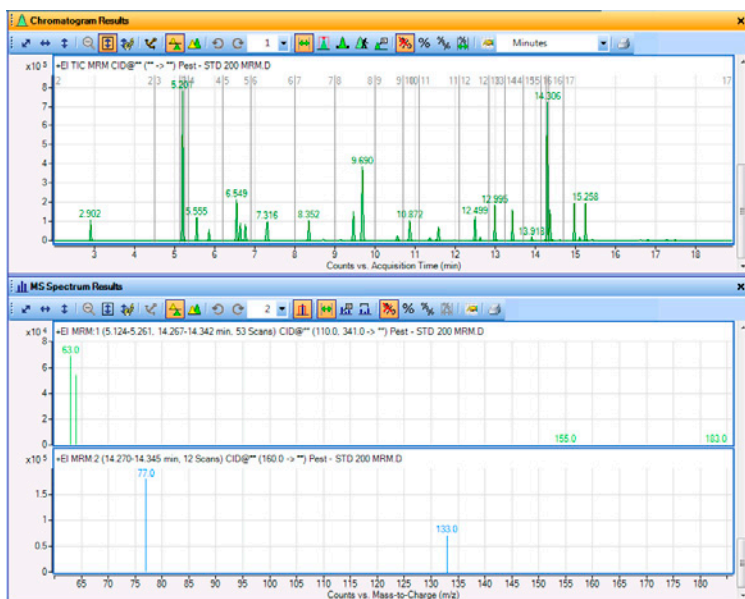
Figura 21 Resultados de Cromatograma e Resultados de Espectro de MS exibindo dois espectros com média

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma


Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>5 Extraia os espectros que tenham as médias de picos a 5.2 minutos e a 14.3 minutos juntos, para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> Dica: Utilize o icone Range Select e a tecla Ctrl para selecionar a amplitude do Pico 1, coletada a partir do ponto médio. Extraia os espectros utilizando uma das opções à direita. 	<p>a Clique no icone Zoom Out, na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p> <p>b Pressione a tecla Ctrl.</p> <p>c Clique no lado esquerdo do pico a 5.2 minutos e arraste-o para a direita do pico, em seguida, solte o mouse.</p> <p>d Pressione a tecla Ctrl.</p> <p>e Extraia os espectros com média usando esta opção ou aquela à direita: <ul style="list-style-type: none"> Clique duas vezes sobre a amplitude selecionada em qualquer um dos picos. </p>	<ul style="list-style-type: none"> Lembre-se de que o segundo pico já tem uma amplitude selecionada a partir do passo 4. Para extrair espectros, você pode também clicar com o botão direito sobre o cromatograma e clicar em Extract MS Spectrum. A caixa de diálogo Etract Spectrum é exibida. Clique em Extract.



O primeiro espectro tem transições de ambas as amplitudes de tempo. O segundo espectro tem apenas uma amplitude de tempo porque a transição a 160.00 -> ** não está presente no pico a 5.2 minutos.

Figura 22 Dois espectros com média a partir e duas amplitudes de tempo diferentes no cromatograma.

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>6 Subtraia um espectro de fundo para cada vez que você extrair um espectro de Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Exclua qualquer rastreamento sob User Spectra, em Data Navigator. • Extraia um espectro de fundo que seja a média de um espectro, no início do pico, e um espectro no final do pico. • Extraia um espectro da lista de picos integrados. 	<p>a Clique sobre a linha User Spectra em Data Navigator. Clique com o botão direito sobre a linha User Spectra e, em seguida, clique em Delete.</p> <p>b Clique sobre Yes.</p> <p>c No Method Explorer, selecione Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>d Clique na aba Peak Spectrum Extraction (MS/MS), se não estiver visível.</p> <p>e Na caixa Peak spectrum background MS/MS, selecione Average of spectra at peak start and end.</p> <p>f Na barra de ferramentas Chromatogram Results, clique sobre o ícone Peak Select .</p> <p>g Clique sobre o comando Chromatograms > Integrate.</p> <p>h Selecione o pico a 5.206 minutos.</p> <p>i Clique com o botão direitos e, em seguida, clique em Extract Peak Spectrum no menu de atalhos.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Observe que, ao final deste processo, todos os picos de espectros extraídos terão, automaticamente, o espectro de plano de fundo designado subtraído.

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

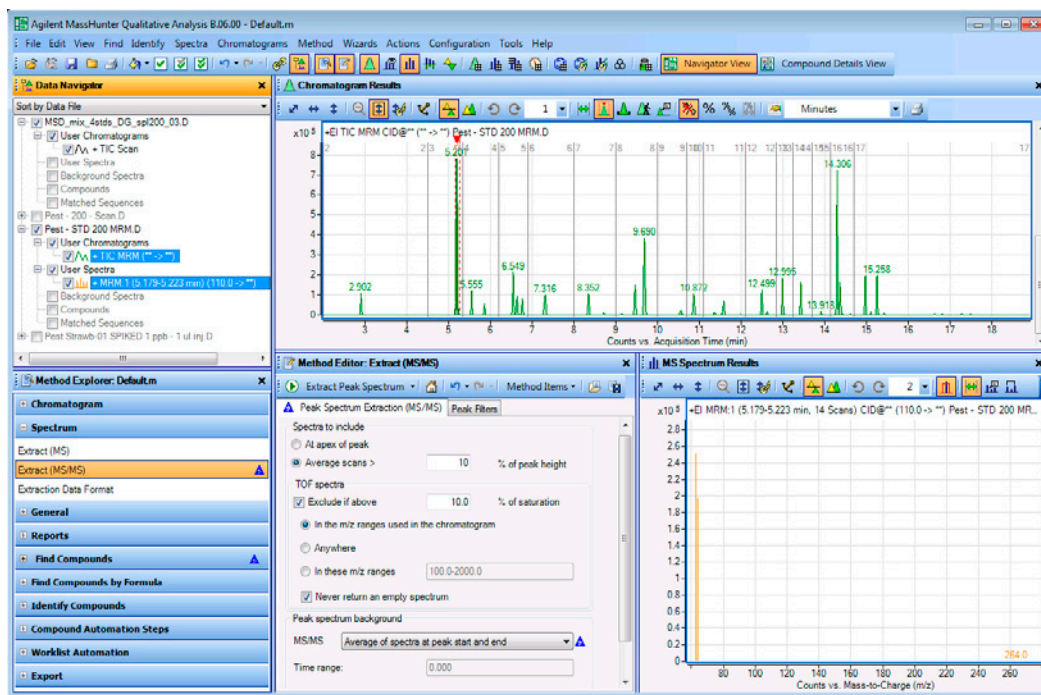


Figura 23 Espectros de pico com espectro de fundo subtraído

Tarefa 9. Extrair espectros de um cromatograma

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
7 Integre e extraia os espectros de pico do arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d.	<p>a Clique sobre o cromatograma TIC MRM na janela Data Navigator.</p> <p>b Clique em Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none"> O espectro de pico que você extraiu manualmente no passo anterior é excluído automaticamente porque, por padrão, a caixa de marcação Clear previous peak spectra é marcada na aba Chromatograms > Integrate (MS/MS) > Results.

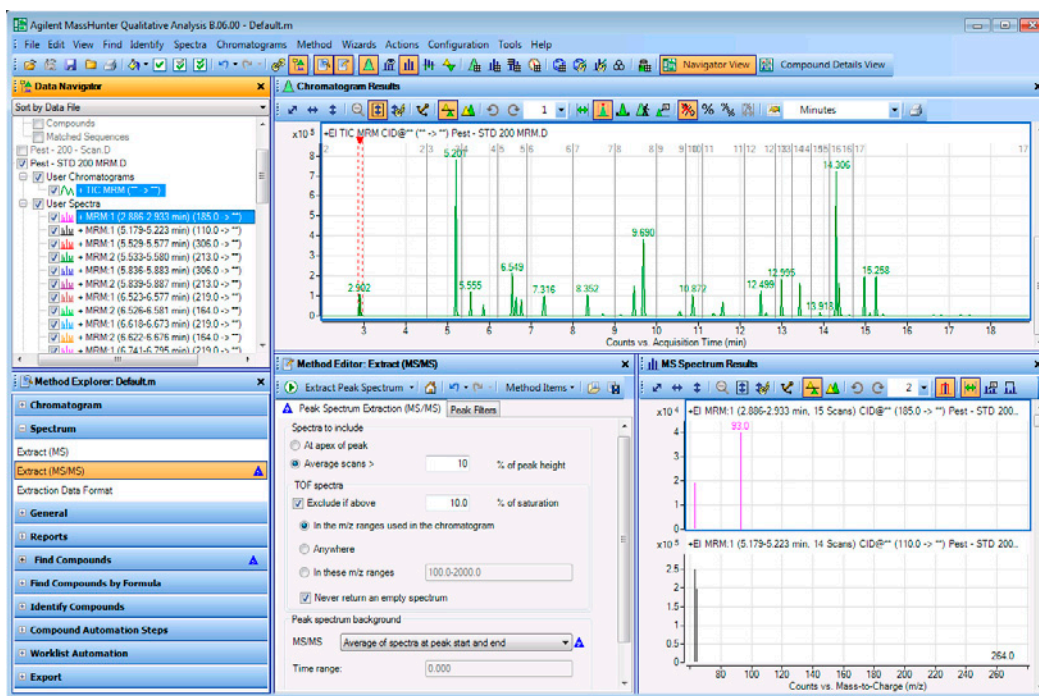


Figura 24 Integrar e Extrair os Espectros de Pico

8 Remover os resultados de integração e os espectros de pico.	<p>a Selecione o arquivo de dados Pest - Std 200 MRM.d</p> <p>b Clique em Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você pode, em vez disso, clicar em Chromatograms > Clear Results > Only Chromatograms, se você não quiser excluir o espectro de pico excluído.
---	--	---


Tarefa 10. Adicionar anotações

Você pode adicionar uma anotação de imagem ou anotação de texto à seguinte janela de gráficos:

- Janela Chromatogram Results
- Janela MS Spectrum Results

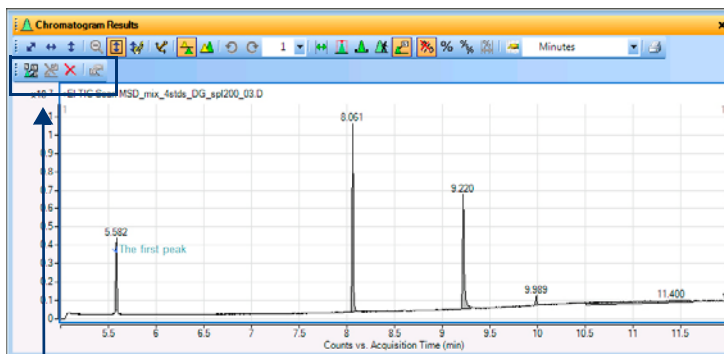
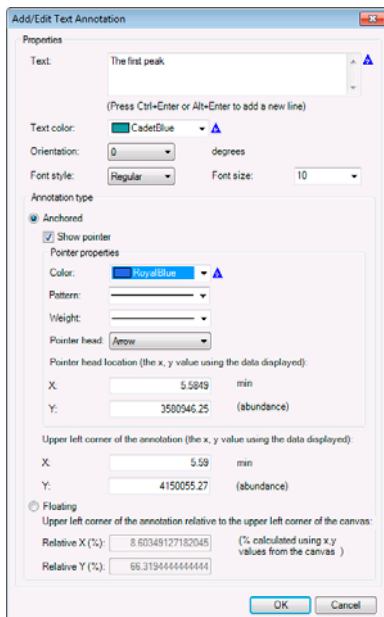
Se você tiver os resultados do arquivo de dados, anotações também serão salvas.

Tarefa 10. Adicionar anotações

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Selecione o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Esconda outros cromatogramas.</p>	<p>a Marque a caixa de marcação próxima a MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D na janela Data Navigator.</p> <p>b Clique em Edit > Show > Only Highlighted.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Os cromatogramas para os outros arquivos de dados são ocultados automaticamente.
<p>2 Selecione o local no cromatograma onde você gostaria de adicionar a anotação de texto.</p>	<p>a Na janela Chromatogram Results, clique na ferramenta Annotation () na barra de ferramentas.</p> <p>b Mova o cursor para o local no painel do cromatograma onde você quer adicionar a anotação.</p> <p>c Clique com o botão direito e, em seguida, clique em Add Text Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • O cursor mudará para uma mira. Você utilizará este cursor para selecionar a localização exata onde quer adicionar a anotação. • A barra de ferramentas Annotate estará disponível na janela Chromatogram Results. • Você também pode adicionar anotações à janela MS Spectrum Results.

Tarefa 10. Adicionar anotações (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>3 Adicione a informação sobre a anotação de texto na caixa de diálogo Add/Edit Text Annotation.</p>	<p>a Digite em Text a anotação. b Selecione a cor em Text color. c Selecione a orientação em Orientation. d Selecione o tipo de fonte em Font style e o tamanho em Font size. e Clique ou em Anchored, ou em Floating. Se você clicar em Anchored, poderá selecionar as opções para o indicador do texto da anotação. Se você clicar em Floating, poderá modificar a posição relativa. É mais fácil modificar a posição interativamente na janela gráficos. f Clique em OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode adicionar múltiplas anotações a um cromatograma ou espectro. • Você pode usar os ícones na barra de ferramentas Annotate para selecionar todas as anotações, excluir anotações e editar anotações.



A barra de ferramentas Annotate está disponível apenas quando a ferramenta Annotate é selecionada.

Figura 25 A caixa de diálogo Add/Edit Text Annotation e a janela Chromatogram Results

1 Aprenda noções de análise qualitativa

Tarefa 10. Adicionar anotações

Tarefa 10. Adicionar anotações (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários	
4	<p>Selecione o local no cromatograma para adicionar a a notação da imagem.</p>	<p>a Mova o cursor para o local no painel do cromatograma onde você quer adicionar a anotação.</p> <p>b Clique com o botão direito e, em seguida, clique em Add Image Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Você pode adicionar um arquivo de imagem JPG ou MOL.
5	<p>Adicione a informação sobre a anotação de texto na caixa de diálogo Add/Edit Text Annotation.</p>	<p>a Digite em Text a anotação.</p> <p>b Digite 50 para a espessura em Scale.</p> <p>c Marque a caixa de marcação Lock aspect ratio.</p> <p>d Clique em Floating. Você pode alterar a posição relativa. É mais fácil modificar a posição interativamente na janela gráficos.</p> <p>e Clique em OK.</p> <p>f Mova a imagem para a o canto superior direito do cromatograma.</p>	<ul style="list-style-type: none">• O arquivo Agilent_Logo.tif está incluído na pasta \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter. Você precisa convertê-lo para um arquivo JPG.• Você pode adicionar múltiplas anotações a um cromatograma ou espectro.

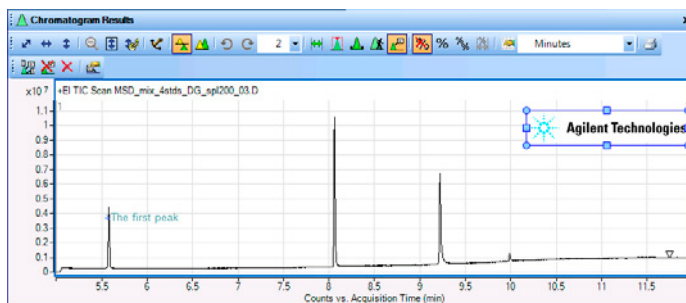
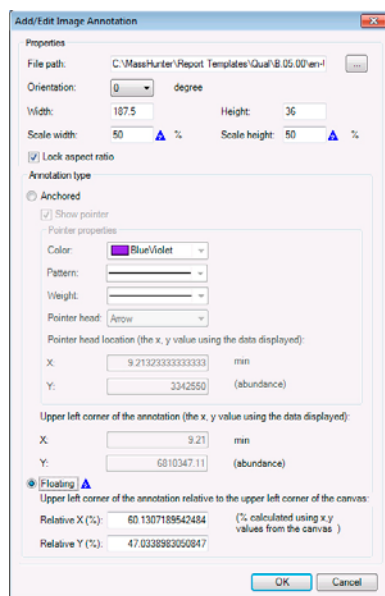
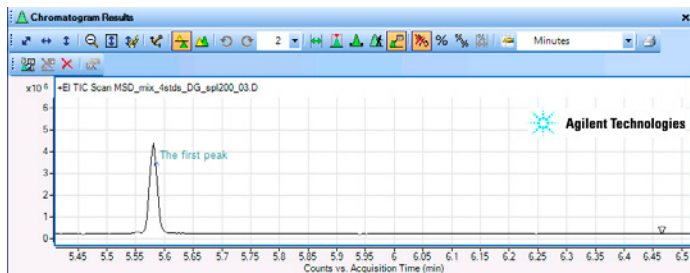


Figura 26 A caixa de diálogo Add/Edit Image Annotation e a janela Chromatogram Results.



Tarefa 10. Adicionar anotações (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
6 Aumente a visualização para o primeiro pico.	<ul style="list-style-type: none"> • Aumente a visualização para uma área ao redor do primeiro pico a 5.5 minutos. 	



Se a anotação estiver fixa, ela permanecerá na posição designada. Se você aumentar o zoom para um pico diferente, uma anotação fixa pode não ficar visível. Se uma anotação estiver fluando, então ela sempre será exibida na mesma posição relativa ao canto superior esquerdo da janela.

Figura 27 A caixa de diálogo Add/Edit Image Annotation e a janela Chromatogram Results.

7 Alterne novamente para a ferramenta Range Select na janela Chromatogram Results. Exclua a anotação antes.	<p>a Clique sobre o ícone  para remover todas as anotações.</p> <p>b Clique sobre o ícone  (Range Select) na barra de ferramentas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Se você quiser salvar as anotações com os resultados do arquivo de dados, veja “Tarefa 17. Salvar resultados” na página 69. • Você pode alternar entre cinco diferentes ferramentas na barra de ferramentas Chromatogram Results. Consulte a Ajuda online para mais informações. As cinco ferramentas são: <ul style="list-style-type: none"> • Range Select • Peak Select • Manual Integration • Walk Chromatogram • Annotation Mouse
---	---	---

1 Aprenda noções de análise qualitativa


Tarefa 11. Adicione um compasso de massa

Tarefa 11. Adicione um compasso de massa


Um compasso exibe a diferença entre dois pontos em um espectro. Você pode adicionar um compasso à janela MS Spectrum Results.

Se você tiver os resultados do arquivo de dados, compassos também serão salvos.

Tarefa 11. Adicione um compasso de massa

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Integre e extraia o espectro de pico do MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<ol style="list-style-type: none">Marque a caixa de marcação próxima a MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D na janela Data Navigator.Clique em Edit > Show > Only Highlighted.Clique em Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.Feche a janela do Method Editor.	
2 Adicione um compasso para o espectro de pico criado na tarefa anterior.	<ol style="list-style-type: none">Na janela MS Spectrum Results, clique na ferramenta Delta Mass Caliper () na barra de ferramentas.(opcional) Selecione Profile Point to Point para o tipo de compasso na barra de ferramentas de Compasso.Aumente a visualização de 66 para 132 <i>m/z</i>.Mova o cursor para o local no painel do espectro onde você quer adicionar o compasso.Arraste o cursor até o ponto final do compasso no espectro. Enquanto você arrasta o cursor, o valor da massa delta será modificado. Quando você soltar o botão do mouse, o compasso será adicionado.	<ul style="list-style-type: none">O cursor será mudado para uma seta. Você utilizará este cursor para definir um ponto inicial e final para o compasso.Você não pode selecionar o tipo de compasso se o espectro for centróide, porque Profile Point to Point não tem efeito sobre dados centróides.O cursor “triângulo” é definido para o topo do pico selecionado.

Tarefa 11. Adicione um compasso de massa (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
3 Modifique o compasso para utilizar uma cor diferente.	<p>a Clique sobre o compasso criado no passo anterior.</p> <p>b Clique sobre o botão Propriedades do Compasso () na barra de ferramentas MS Spectrum Results Caliper.</p> <p>c (opcional) Digite os valores de Start X e de Start Y.</p> <p>d Selecione a cor em Text color.</p> <p>e Selecione o tipo de fonte em Font style e o tamanho em Font size.</p> <p>f Clique em OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode adicionar múltiplos compassos a um espectro. • Você pode utilizar os ícones na barra de ferramentas Caliper para selecionar todos os compassos, excluir compassos ou editá-los.

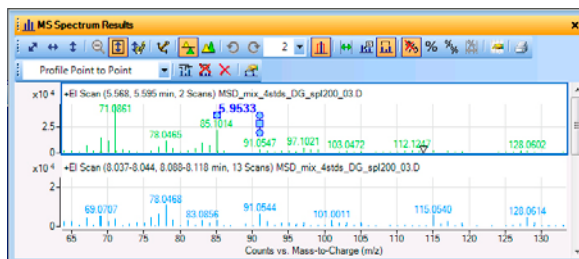
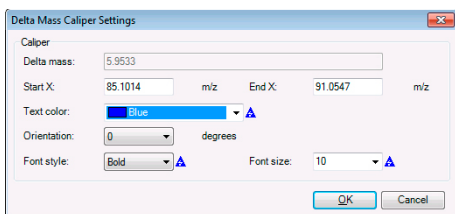
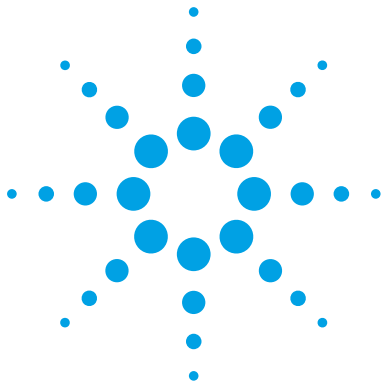


Figura 28 A caixa de diálogo Delta Mass Caliper Settings e a janela MS Spectrum Results

4 Excluir resultados de integração e espectros.	<p>a Clique em Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p> <p>b Clique na ferramenta Range Select.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Se você quiser salvar os compassos para os resultados de arquivos de dados, consulte “Tarefa 17. Salvar resultados” na página 69.
--	--	---

1 Aprenda noções de análise qualitativa
Tarefa 11. Adicione um compasso de massa



2 Encontre e Identifique

Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma	48
Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library	52
Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)	57
Tarefa 15. Encontre compostos por Integração	61
Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico	64
Tarefa 17. Salvar resultados	69

Nestas tarefas, você encontrará e identificará compostos em arquivos de dados GC/MS.

Cada exercício é apresentado em uma tabela com três colunas:

- **Passos** – Use instruções gerais para proceder por conta própria, explorando o programa.
- **Instruções Detalhadas** – Utilize-as se você precisar de ajuda ou se preferir um processo de aprendizado passo-a-passo.
- **Comentário** – Leia-os para obter dicas e informação adicional sobre cada passo no exercício.



2 Encontre e Identifique

Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma

Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma

O algoritmo FindCompounds identifica compostos em dados GC/MS e cria um espectro MS limpo para cada composto. Esta função é um modo fácil de “minar” informações de dados complexos. Você pode usar apenas o algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution em dados de amostra do GC/MS adquiridos no modo de rastreamento Scan, Product Ion Scan ou Neutral Loss.

A tarefa exibe compostos por deconvolução de cromatograma com dados de massa precisos. Você também pode encontrar compostos por deconvolução do cromatograma com dados de massa de unidade após você modificar a primeira janela de extração.

Tarefa 12. Encontre compostos utilizando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Abra o TIC para o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone MassHunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC.</p> <p>c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• O algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution funciona com ambos os arquivos de dados GC/QQQ e GC/Q-TOF.

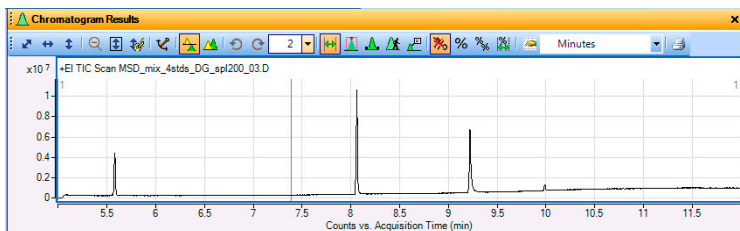


Figura 29 O cromatograma TIC a partir de Pest - 200 - Scan.d

2 Configure a interface do usuário para que funcione com os dados do CG.	<ul style="list-style-type: none">• Siga as instruções apresentadas em “Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS” na página 13.	<ul style="list-style-type: none">• Para estes exemplos, selecione o fluxo de trabalho do GC/Q-TOF Compound Screening.
--	---	--

Tarefa 12. Encontre compostos utilizando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>3 Encontre compostos utilizando o algoritmo de deconvolução do cromatograma.</p> <ul style="list-style-type: none"> Selecione o integrador Agile. Insira um limite SNR de 20. Insira 100 ppm para os valores Left m/z delta e Right m/z delta. 	<p>a Na janela Method Explorer, selecione Find Compounds > Find by Chromatogram Deconvolution.</p> <p>b Na aba Configurações, sob filtro de Pico, digite 20 para o limite SNR.</p> <p>c Selecione PPM para m/z delta units.</p> <p>d Insira 100 para Left m/z delta e 100 para Right m/z delta.</p>	<ul style="list-style-type: none"> A seção Find by Chromatogram Deconvolution também está disponível na seção GC/Q-TOF Compound Screening. Se você tem dados de massa de unidade, você deve inserir 0.3 AMU para o valor de Left m/z delta e 0.7 AMU para o valor de Right m/z delta. Você pode extrair o conjunto de resultados completos para um composto após encontrá-lo usando o item do menu Compounds > Extract Complete Result Set, quando um composto for destacado.

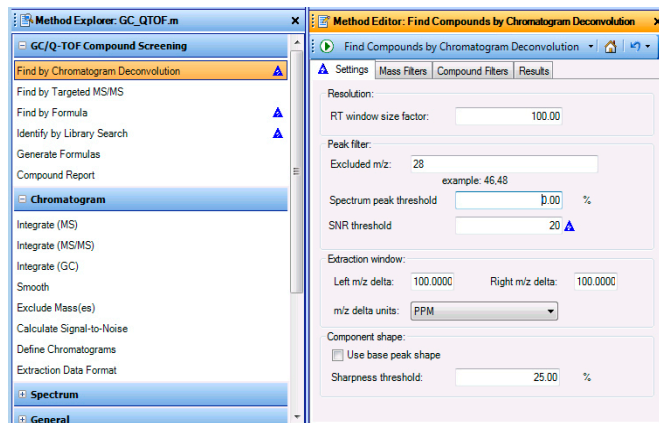



Figura 30 Aba de configurações na seção Find by Chromatogram Deconvolution.

2 Encontre e Identifique

Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma

Tarefa 12. Encontre compostos utilizando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<ul style="list-style-type: none">Selecione extrair EIC, espectro MS e espectro MS/MS.	<ul style="list-style-type: none">e Clique na aba Results.f Marque as caixas de marcação Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum e Extract raw spectrum.g Clique em  para rodar o algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution no arquivo de dados.h Se necessário, clique no comando View > Compound List command.	<ul style="list-style-type: none">O programa Qualitative Analysis encontra até 4 compostos sob estas condições.Se o arquivo de dados não estiver indexado, pode levar bastante tempo para executar este algoritmo.
4 Examine os compostos. Consulte Figura 31 na página 51.	<ul style="list-style-type: none">a Selecione 2 na caixa Maximum number of list panes, na caixa de ferramentas MS Spectrum Results.b Clique sobre o ícone Hide Empty Columns na janela Compound List.c Clique sobre o primeiro composto na janela Data Navigator.d Quando a janela Data Navigator estiver selecionada, utilize as setas do teclado para alternar compostos.	<ul style="list-style-type: none">Exibir ambos os espectros é um modo conveniente de se exibir toda a informação para um único composto.Observe que tanto o espectro limpo, quanto o espectro sujo são exibidos.

Tarefa 12. Encontre compostos utilizando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
-------	-----------------------	-------------

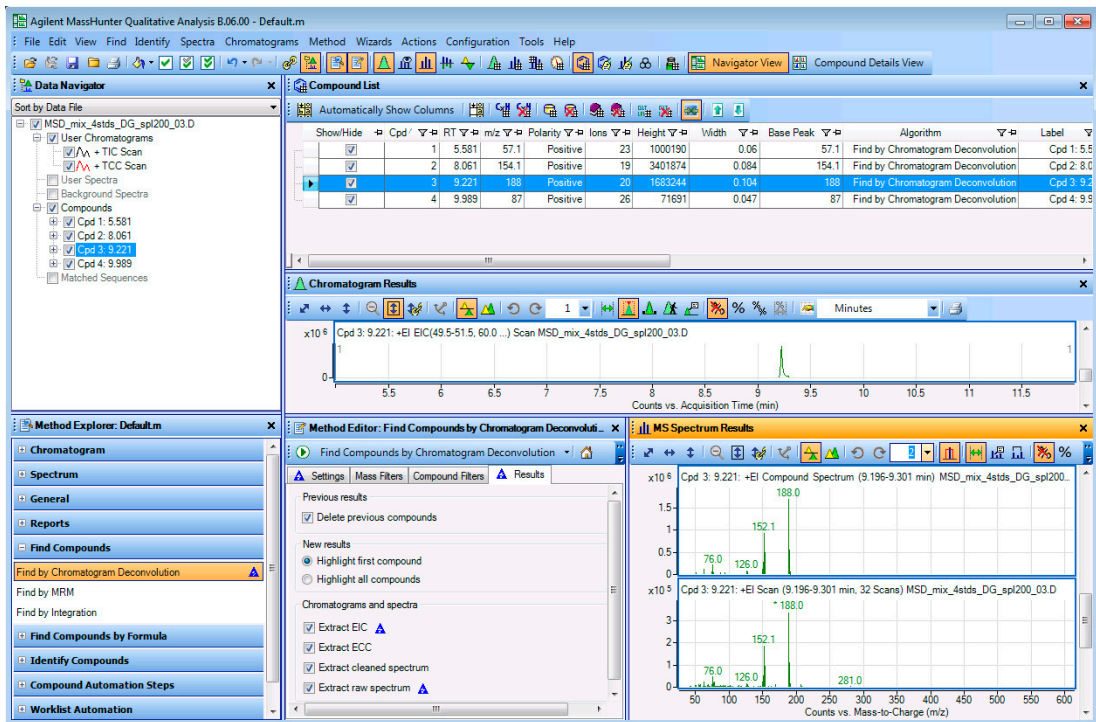


Figura 31 Encontre Compostos por meio dos resultados de Deconvolução do Cromatograma



2 Encontre e Identifique

Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library

Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library

Nesta tarefa, você identificará e gerará fórmulas para os compostos encontrados em “[Encontre compostos pela deconvolução do cromatograma](#)” na página 48. Você pode realizar esta tarefa se você tiver comprado a biblioteca *NIST08.l* ou se utilizar a biblioteca *demo.l*. Se você tem duas bibliotecas, você pode selecionar ambas.



Tarefa 13. Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library.

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Realize uma busca de biblioteca de todos os compostos no arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p>	<p>a Destaque os compostos no arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D na janela Data Navigator.</p> <p>b Na janela Method Explorer, clique em Identify Compounds > Search Unit Mass Library.</p> <p>c Na aba Settings, clique no botão Add Library. Selecione a biblioteca demo.I e clique sobre o botão OK.</p> <p>d (opcional) Na aba Settings, clique no botão Add Library. Selecione a biblioteca NIST08.I e clique sobre o botão OK.</p> <p>e Clique na aba Search Results.</p> <p>f (opcional) Selecione Stop When Found para o modo de busca Multi-Library.</p> <p>g Clique em Identify > Search Library for Compounds no menu principal. Você pode, em vez disso, clicar sobre o ícone Search Library for Compounds  para executar o algoritmo.</p> <p>h Clique em View > Difference Results.</p> <p>i Clique em View > Structure Viewer.</p> <p>j Clique em View > Compound Identification Results, se necessário, para exibir esta janela.</p> <p>k Se necessário, clique sobre a aba para abrir a janela Compound Identification Results. Esta janela tem abas com a janela Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você também pode clicar em GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search no Method Explorer. A mesma seção na janela do Method Editor é exibida. • Demo.I e Nist08 devem estar instalados na pasta \MassHunter\Library. • Observe que muitos compostos são identificados após buscar na biblioteca <i>NIST08.I</i>. • Se você não tiver a biblioteca <i>NIST08.I</i>, selecione uma outra biblioteca que você tenha disponível. • Se você tiver duas ou mais bibliotecas selecionadas e você selecionar Stop When Found, o algoritmo de busca da biblioteca buscará pela primeira biblioteca da lista. Se o composto for identificado, então ele será interrompido. Se o composto não for identificado, então ele buscará pela próxima biblioteca até que o composto seja identificado ou até que a última biblioteca tenha sido buscada. • Você utiliza o programa Library Editor para modificar bibliotecas que você utiliza com o algoritmo Search Unit Mass Library. Este programa é instalado com o programa Agilent MassHunter Quantitative Analysis. Clique no ícone  para iniciar este programa.

2 Encontre e Identifique

Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library

Tarefa 13. Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library.

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
2 Exiba as colunas Spectral Library Results na janela Compound List e na janela Compound Identification Results.	<p>a Clique no botão Show Library Search Column () na barra de ferramentas Compound List e na barra de ferramentas Compound Identification Results.</p> <p>b Clique no botão Hide Empty Columns () na barra de ferramentas Compound List e na barra de ferramentas Compound Identification Results.</p>	

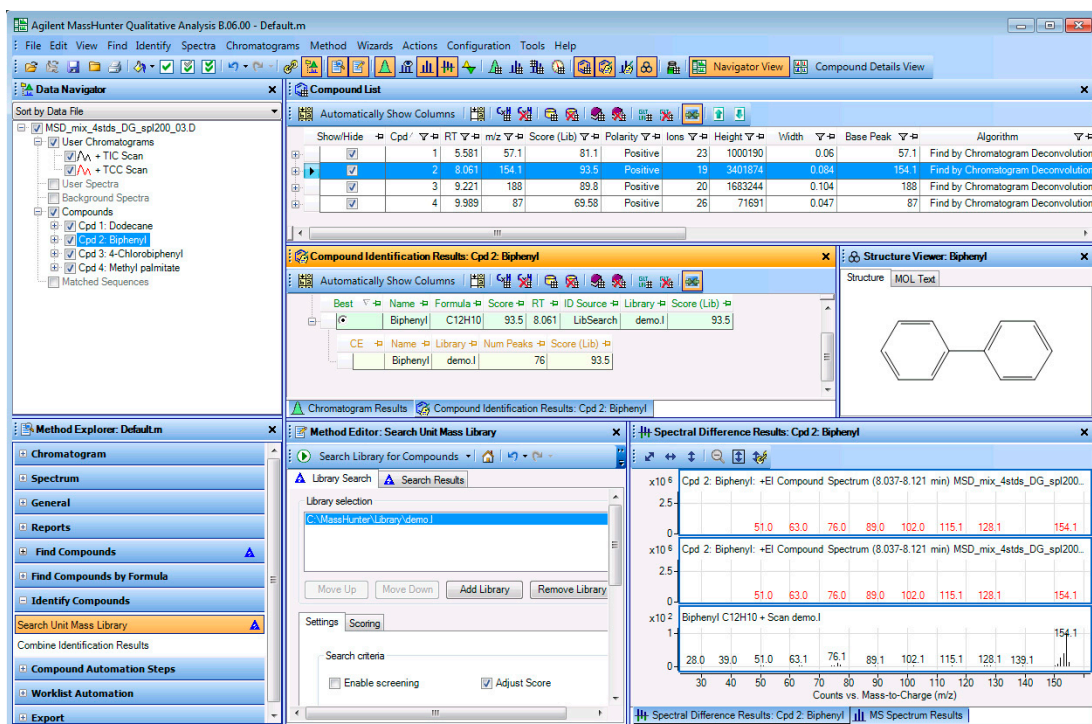



Figura 32 Compostos no arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D e nos resultados de busca da biblioteca

Tarefa 13. Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library.

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
3 Altere para Compound Details View para revisar os compostos.	<p>a Clique em  Compound Details View na barra de ferramentas principal.</p> <p>b Feche a janela Compound Fragment Spectrum Results.</p>	
4 Reveja os resultados em Compound Details View.	<p>a Clique sobre o ícone Overlaid na janela Compound Chromatogram Results.</p> <p>b Expanda os resultados na janela Compound Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode descobrir mais sobre a Compound Details View na Ajuda online. A Compound Details View é muito útil quando você procura por resultados do algoritmo Find by Formula com um arquivo de dados adquirido no modo All Ions.

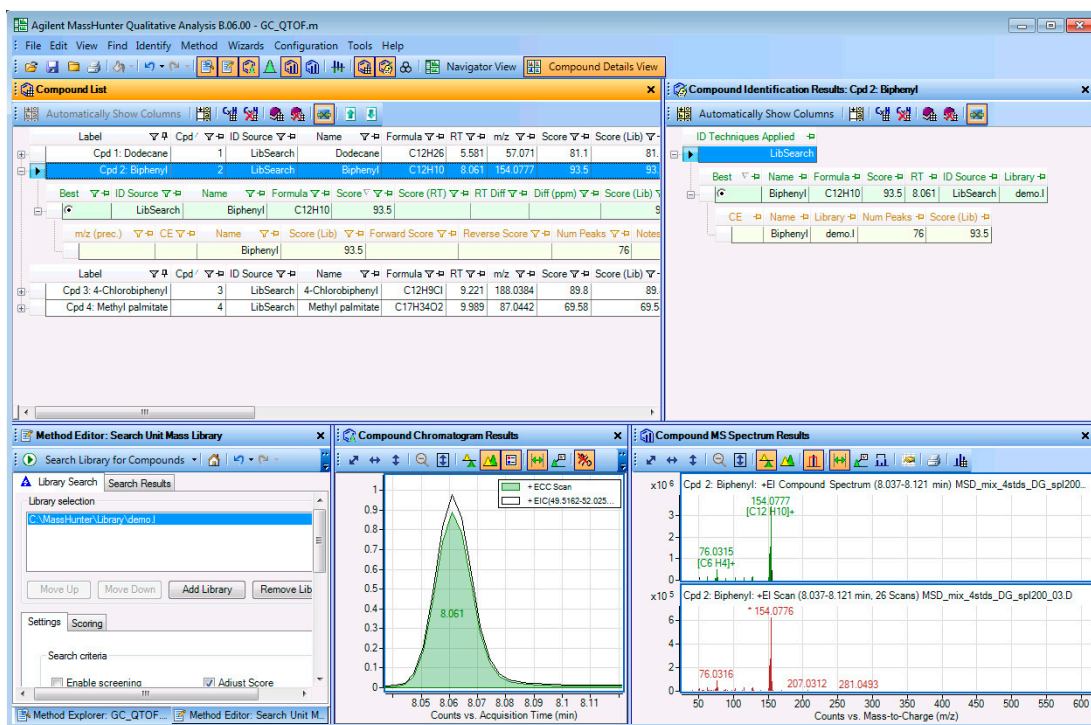



Figura 33 Compound Details View exibindo compostos no arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D

2 Encontre e Identifique

Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library

Tarefa 13. Identifique compostos utilizando o algoritmo Search Library.

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
5 Volte para a Visualização de Navegador.	<ul style="list-style-type: none">• Clique sobre o botão  Compound Details View na barra de ferramentas principal.	
6 Feche o arquivo de dados.	<ul style="list-style-type: none">a Clique em File > Close Data File.b Clique em No.	<ul style="list-style-type: none">• Se você quiser salvar estes resultados, veja "Tarefa 17. Salvar resultados" na página 69.

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

O algoritmo Find Compounds by MRM identifica compostos em dados MRM a partir de um Quadrupolar Triplo. A busca de algoritmos para compostos utilizando transições MRM. Todos os compostos no método de aquisição são extraídos e exibidos na Compound List. Os compostos não são eliminados com base nos resultados de integração do cromatograma. Você pode usar o Find Compounds apenas através do algoritmo MRM em dados que foram adquiridos utilizando transições MRM. O algoritmo MRM utiliza informações que foram encontradas no arquivo de dados se o arquivo de dados for um arquivo de dados MRM.

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Abra o TIC para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d .	<p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique no arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d, na pasta de arquivos de dados de exemplo GC.</p> <p>c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você deve utilizar o General Workflow quando trabalhar com dados GC/QQQ. Você utiliza ou o General Workflow ou o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening quando trabalha com dados do GC/Q-TOF.

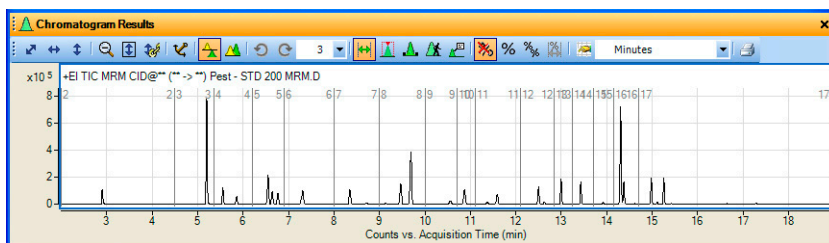


Figura 34 O cromatograma TIC a partir de Pest - STD 200 MRM.d

- | | |
|--|---|
| 2 Configure a interface do usuário para que funcione com os dados do CG. | <ul style="list-style-type: none"> Siga as instruções apresentadas em "Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS" na página 13. |
|--|---|

2 Encontre e Identifique

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
3 Encontre compostos utilizando o algoritmo MRM.	<p>a Na janela Method Explorer, selecione Find Compounds > Find by MRM.</p> <p>b Clique no botão Group transitions by compound name.</p> <p>c Clique sobre a aba Integrator.</p> <p>d Selecione o integrador Agile.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Você pode optar pela região do cromatograma a partir da qual você pretende encontrar os compostos.• Você pode extrair o conjunto de resultados completos para um composto após encontrá-lo usando o item do menu Compounds > Extract Complete Result Set, quando um composto for destacado.

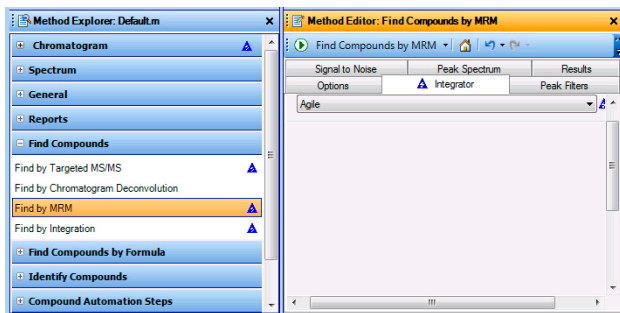



Figura 35 A aba do integrador na seção Find by MRM do Method Editor.

- e** Clique em  para rodar o algoritmo **Find Compounds by MRM** no arquivo de dados.
- f** Se necessário, clique no comando **View > Compound List** command.
- g** Se necessário, clique no comando **View > Compound Identification Results**.
- O programa Qualitative Analysis encontra até 28 compostos sob estas condições.

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>4 Examine os compostos. Consulte Figura 36 na página 59.</p>	<p>a Selecione 2 na caixa Maximum number of list panes, na caixa de ferramentas MS Spectrum Results.</p> <p>b Clique no ícone Automatically Show Columns na janela Compound List e na janela Compound Identification Results.</p> <p>c Clique sobre o primeiro composto na janela Data Navigator.</p> <p>d Quando a janela Data Navigator estiver selecionada, utilize as setas do teclado para alternar compostos.</p>	<ul style="list-style-type: none"> O íon precursor é exibido na coluna Precursor (Acq Method) e o íon produto é exibido na coluna Product (Acq Method) na janela Compound Identification Results.

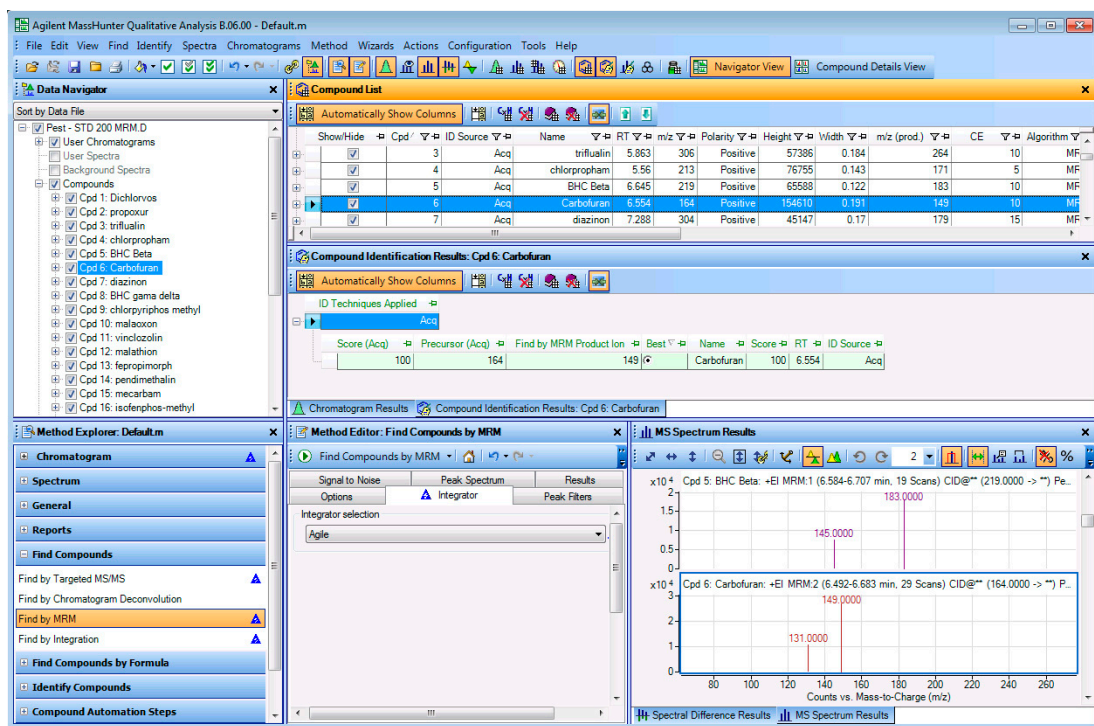


Figura 36 Encontre os resultados do MRM.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Tarefa 14. Encontre compostos por MRM (MRM apenas)

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
5 Feche o arquivo de dados.	a Clique em File > Close Data File . b Clique em Close .	• Se você quiser salvar estes resultados, veja “ Tarefa 17. Salvar resultados ” na página 69.

Tarefa 15. Encontre compostos por Integração

O algoritmo Find Compounds by Integration identifica compostos com base nos resultados de integração. Um composto é criado para cada pico que é identificado pelo integrador.

Tarefa 15. Encontre compostos por Integração

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
1	<p>Abra o TIC para o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D.</p> <p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique no arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d, na pasta de arquivos de dados de exemplo GC.</p> <p>c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você deve utilizar o General Workflow quando trabalhar com dados GC/QQQ. Você utiliza ou o General Workflow ou o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening quando trabalha com dados do GC/Q-TOF.

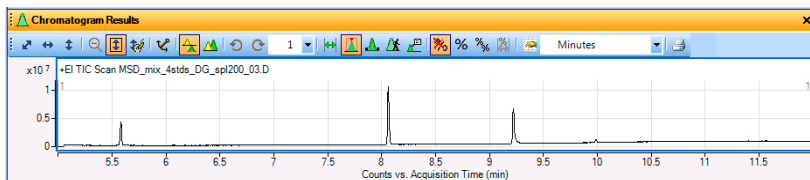


Figura 37 Cromatograma TIC de MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2	<p>Configure a interface do usuário para que funcione com os dados do CG.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Siga as instruções apresentadas em “Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS” na página 13.
3	<p>Encontre compostos utilizando o algoritmo de integração.</p> <p>a Na janela Method Explorer, selecione Find Compounds > Find by Integration.</p> <p>b Selecione o integrador MS/MS (GC).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você pode optar pela região do cromatograma a partir da qual você pretende encontrar os compostos. Você pode extrair o conjunto de resultados completos para um composto após encontrá-lo usando o item do menu Compounds > Extract Complete Result Set, quando um composto for destacado.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 15. Encontre compostos por Integração

Tarefa 15. Encontre compostos por Integração

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
-------	-----------------------	-------------

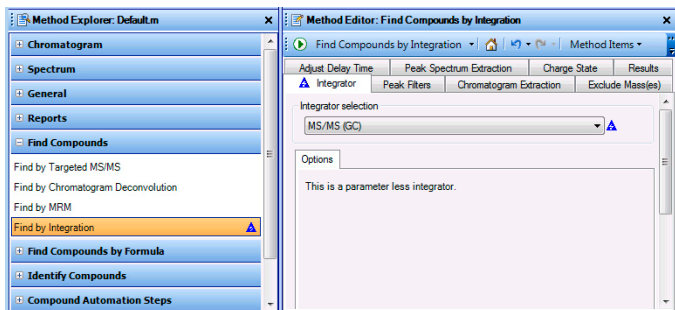



Figura 38 A aba do integrador na seção Find by Integration do Method Editor.

- c Clique em  para executar o algoritmo **Find Compounds by Integration** no arquivo de dados.
 - d Se necessário, clique no comando **View > Compound List** command.
- O programa Qualitative Analysis encontra até 6 compostos sob estas condições.

4 Examine os compostos. Consulte [Figura 36](#) na página 59.

- a Selecione **2** na caixa **Maximum number of list panes**, na caixa de ferramentas MS Spectrum Results.
- b Clique sobre o ícone **Automatically Show Columns** na janela Compound List.
- c Clique sobre o primeiro composto na janela Data Navigator.
- d Quando a janela Data Navigator estiver selecionada, utilize as setas do teclado para alternar compostos.

Tarefa 15. Encontre compostos por Integração

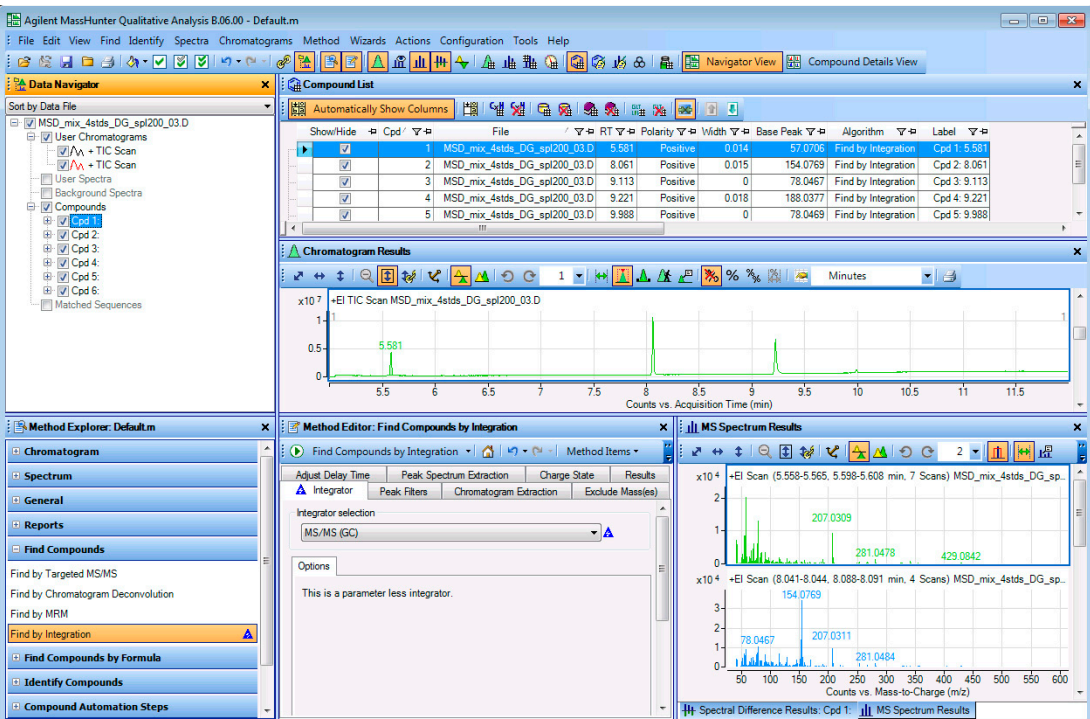
Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários																																										
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 interface. The 'Compound List' table is visible with the following data:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>File</th> <th>RT</th> <th>Polarity</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> <p>The 'Chromatogram Results' plot shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with peaks at retention times 5.581, 8.061, 9.113, 9.221, and 9.988 minutes. The 'MS Spectrum Results' plot shows mass spectra for these peaks, with major peaks labeled at m/z 207.0309, 281.0478, 429.0842, 154.0769, 207.0311, and 281.0484.</p>		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																																						
5	<p>Feche o arquivo de dados.</p> <p>a Clique em File > Close Data File.</p> <p>b Clique em Close.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você quiser salvar estes resultados, veja "Tarefa 17. Salvar resultados" na página 69. 																																										

Figura 39 Encontre por resultados de Integração.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico





Nesta tarefa, você primeiro integra e extrai os espectros de pico de um arquivo de dados GC/Q-TOF. Em seguida, você gera fórmulas possíveis para cada espectros de pico.

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Abra o TIC para o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none">a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC.c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open.	<ul style="list-style-type: none">• Se a caixa de marcação Load result data não estiver disponível, então nenhum resultado foi salvo no arquivo de dados. Veja “Tarefa 17. Salvar resultados” na página 69 para mais instruções sobre como salvar resultados.
2 Integre e extraia o espectro de pico	<ul style="list-style-type: none">a Clique na seção Cromatogramas > Integrar (MS) na janela do Method Explorer.b Clique na aba Peak Filters.c Clique no botão Peak height.d Marque a caixa de marcação Relative height.e Marque a caixa de marcação Limit (by height) to the largest e o tipo 4.f Clique em Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.	

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>3 Gere fórmulas para cada espectro de pico.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Visualize a Spectrum Identification Results List. • Feche a janela MS Spectrum Results. <p>Dica: Para obter os mesmos resultados de Figura 41, garanta que você selecionou Common organic molecules como modelo de isótopo.</p>	<p>a Na janela Method Explorer, clique em Identify Compounds > Generate Formulas.</p> <p>b Na janela Method Editor, clique na aba Charge State e selecione Common organic molecules como modelo de Isótopo.</p> <p>c Na janela Data Navigator, destaque todos os espectros na seção User Spectra.</p> <p>d Clique no comando Identify > Generate Formulas from Spectrum Peaks ou no botão Generate Formulas from Spectrum Peaks  para executar o algoritmo.</p> <p>e Se necessário, clique no ícone Spectrum Identification Results, , ou clique no comando View > Spectrum Identification Results.</p> <p>f Na janela Spectrum Identification Results, clique no botão Automatically Show Columns na barra de ferramentas.</p> <p>g Clique no ícone Hide Empty Columns, , na janela Spectrum Identification Results.</p> <p>h Selecione C6 H13 como resultado Best.</p> <p>i Expanda a tabela para esta sequência.</p> <p>j Feche a janela do Method Editor.</p> <p>k Reveja as Formula and Ion Species que são exibidas muitos picos da janela MS Spectrum Review. Todas as Formula and Ion Species são da mesma cor que o espectro.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Você pode ver as razões de abundância do isótopo previsto no quando seu zoom estiver na m/z apropriada. Consulte a Ajuda online para mais informações. • O ícone Run , na barra de ferramentas do Method Editor, às vezes permite que você escolha uma ação a partir de um conjunto de ações possíveis. Por exemplo, duas ações diferentes são possíveis quando você clica no ícone Executar nesta seção. Se você clicar sobre a seta, uma lista de ações possíveis será exibida, e você pode escolher que ação executar. Escolher uma ação diferente da lista, modifica a ação padrão. Se você simplesmente clicar sobre o botão Run, a ação padrão atual será realizada. • Você pode modificar a largura de uma coluna arrastando a linha que a separa das colunas adjacentes. • Você pode mover uma coluna arrastando seu cabeçalho. • Você pode excluir uma coluna clicando em Remover coluna no menu de atalhos, na tabela.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Etapa

Instruções Detalhadas

Comentários

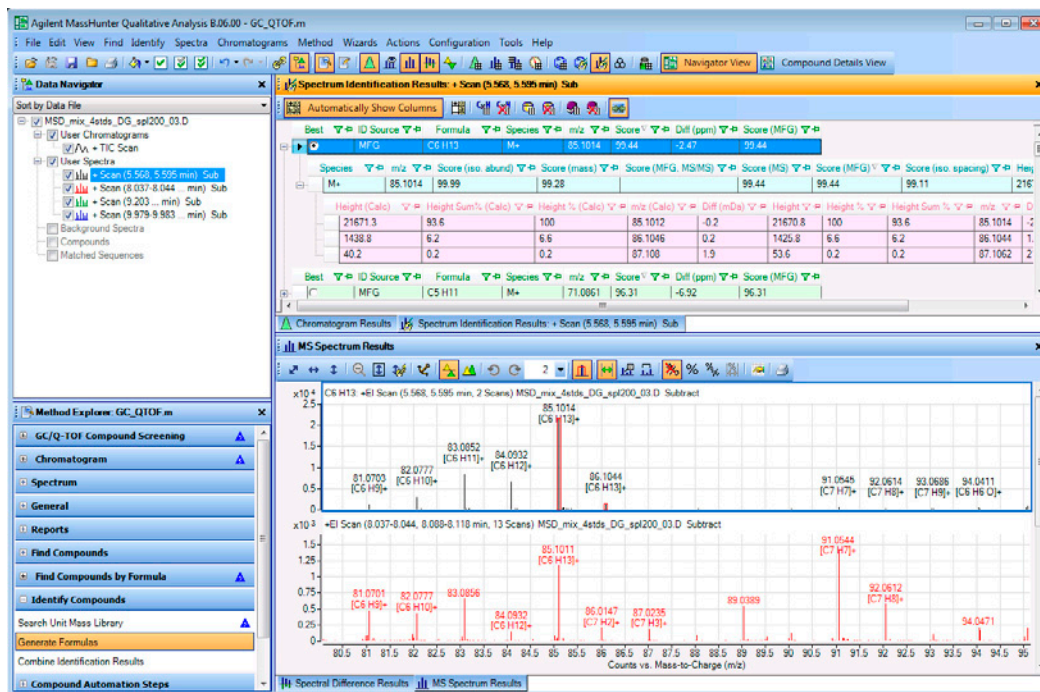


Figura 40 Gerar resultados de Fórmula para picos de 1 a 4


4 Faça uma busca na biblioteca pelos espectros de pico de 1 a 4

- Na janela Data Navigator, clique em **User Spectra**.
- Na janela Method Explorer, clique em **Identify Compounds > Search Unit Mass Library**.
- Verifique se uma biblioteca válida está selecionada.
- Clique em **Identify > Search Library for Compounds** no menu principal.
- Feche a janela do Method Editor.

• O Method Editor é aberto automaticamente quando você abre uma seção do Method Explorer.

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
5 Modificar as colunas visíveis.	<p>a Clique com o botão direito sobre a janela Spectrum Identification Results e clique em Add/Remove Columns. Na caixa de diálogo "(Enhanced) Add/Remove Columns", marque as colunas que você quer exibir. Clique em OK.</p> <p>b Feche a janela do Method Editor.</p> <p>c Clique no ícone Hide Empty Columns, , na janela Spectrum Identification Results.</p> <p>d Reveja as Formula and Ion Species que são exibidas acima de cada pico da janela MS Spectrum Review.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você utilizar o comando Remove Column e remover uma coluna que contém dados, o software irá automaticamente reexibir esta coluna se a função Automatically Show Columns estiver ativa. O algoritmo LibSearch tem grande peso na seção Combine Identification Results do método. Você pode escolher manualmente o resultado MFG ou escolher como os resultados de identificação são combinados.

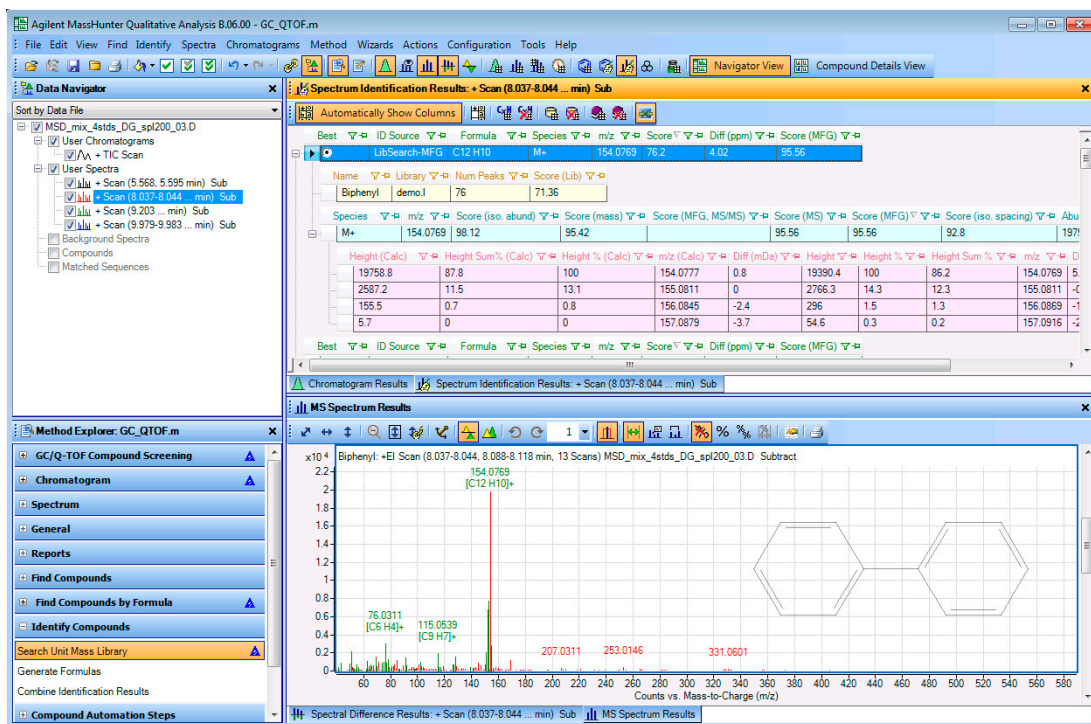


Figura 41 Os resultados de Library Search and Generate Formulas para o primeiro pico de espectros.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Tarefa 16. Gere fórmulas e busque na biblioteca por espectros de pico

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
6	<p>Reveja os resultados para cada espectro na janela MS Peaks One.</p> <p>a Clique em View > MS Spectrum Peak List 1.</p> <p>b Clique com o botão direito e clique em Add/Remove Column.</p> <p>c Verifique as colunas exibidas em Figura 42 estão no Show these columns.</p> <p>d Organize pela coluna Ion Type.</p> <p>e Se o Tipo de Íon for Fragment Ion, então Formula & Ion Species será exibida em verde em cada pico no janela MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Os íons de fragmento são exibidos em verde na janela MS Spectrum Results. O Ion Type pode ser Molecular Ion, Fragment Ion ou nulo. Se for um Íon de Fragmento, em seguida, as colunas Loss Formula e Loss Mass exibem a fórmula e a massa para se chegar até aquele íon a partir do Íon Molecular. A Formula & Ion Species exibe a fórmula e as espécies de íon para aquele íon.

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]+	C8H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C8H3	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
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

Figura 42 Tabela MS Peaks One com colunas **Ion Type**, **Loss Formula**, **Loss Mass** e **Formula & Ion Species**

7 (opcional) Feche o arquivo de dados.	<p>a Clique em File > Close Data File.</p> <p>b Clique em Close.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você quiser salvar estes resultados, veja "Tarefa 17. Salvar resultados" na página 69.
<ul style="list-style-type: none"> Você pode proceder para a próxima tarefa para aprender a como salvar os resultados. 		

Tarefa 17. Salvar resultados

Nesta tarefa, você salvou os resultados para o atual arquivo de dados.

Tarefa 17. Salvar resultados

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
1	<p>Salve os resultados para o atual arquivo de dados e feche o arquivo de dados.</p> <p>a Clique em File > Save Results.</p> <p>b Clique em File > Close Data File.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Você apenas pode salvar um dos conjuntos de resultados com um arquivo de dados. Se você já salvou resultados com o arquivo de dados atual, então estes resultados serão sobrescritos quando você clicar em File > Save Results.
2	<p>Abra o arquivo de dados e carregue os resultados.</p> <p>a Clique em File > Open Data File. A caixa de diálogo "Open Data Files" se abre.</p> <p>b Selecione um arquivo de dados. Para este exemplo, selecione um arquivo de dados para MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Marque a caixa de marcação Load result data.</p> <p>d Clique no botão Open.</p>	

2 Encontre e Identifique

Tarefa 17. Salvar resultados

Tarefa 17. Salvar resultados

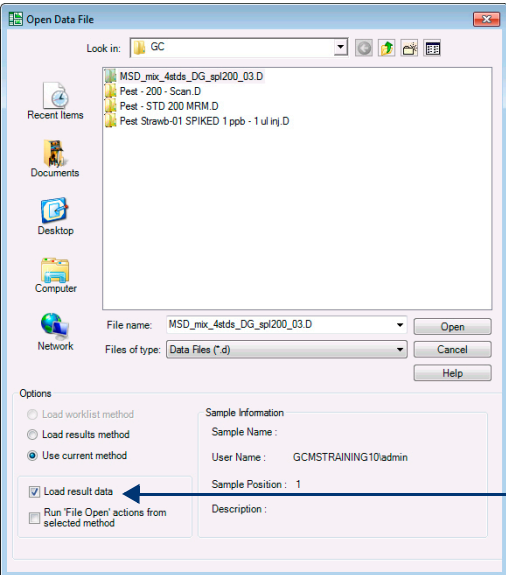
Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
	<p>A caixa de marcação Load Result Data estará marcada.</p>	

Figura 43 Caixa de diálogo Open Data File.

- 3** Examine os resultados.
 - a** Clique na janela **Spectrum Identification Results**.
 - b** Reveja os resultados.

Tarefa 17. Salvar resultados

Etapa

Instruções Detalhadas

Comentários

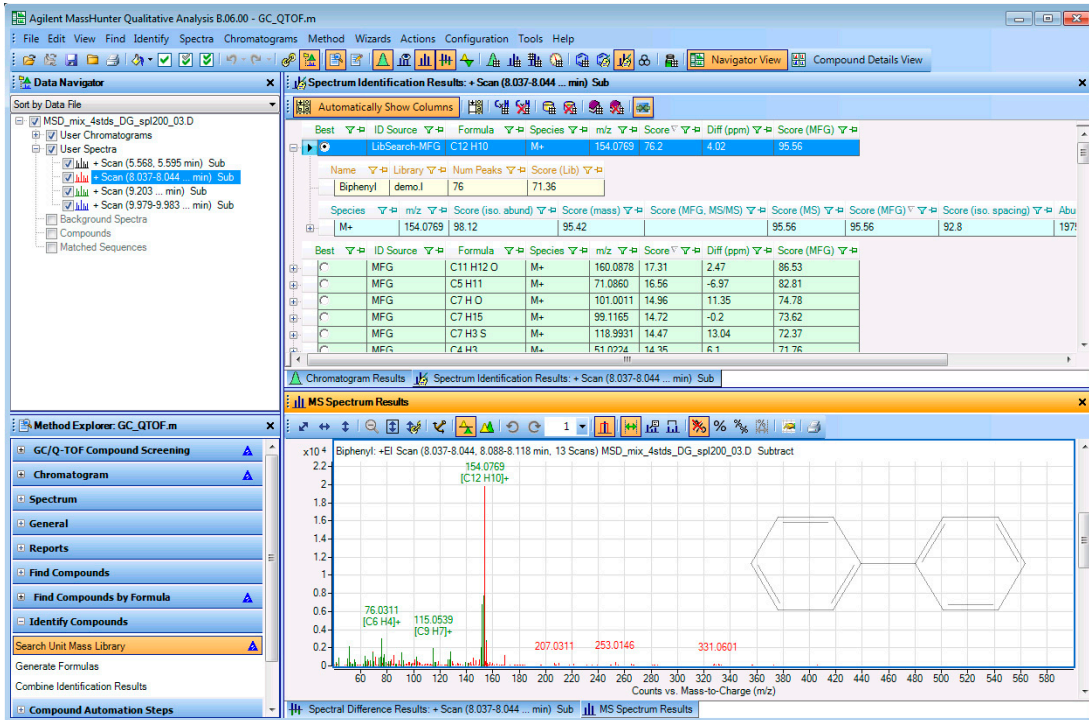


Figura 44 Os resultados de Library Search and Generate Formulas para o primeiro pico de espectros.

4 Feche o arquivo de dados.

- a** Clique em **File > Close Data File**.
- b** Clique em **Close**.

5 Abra o arquivo de dados e não carregue os resultados.

- a** Clique em **File > Open**. A caixa de diálogo "Open Data Files" se abre.
 - b** Selecione um arquivo de dados. Para este exemplo, selecione um arquivo de dados para MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.
 - c** Limpe a caixa de marcação **Load result data**.
 - d** Clique no botão **Open**.
- Se você não carregar os resultados, então, por definição, um TIC será aberto quando você abrir o arquivo de dados. Se você marcar ações Run 'File Open' da caixa de marcação de métodos selecionada, então as ações File Open serão abertas, em vez disso. Consulte a Ajuda online para mais informações.

2 Encontre e Identifique

Tarefa 17. Salvar resultados

Tarefa 17. Salvar resultados

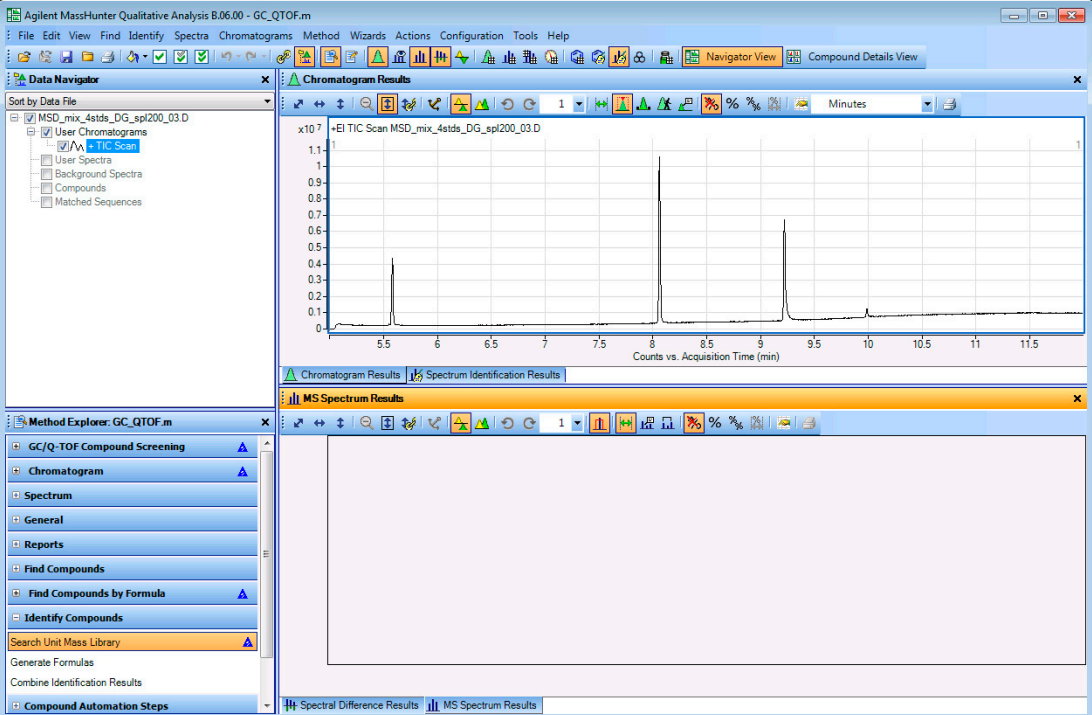
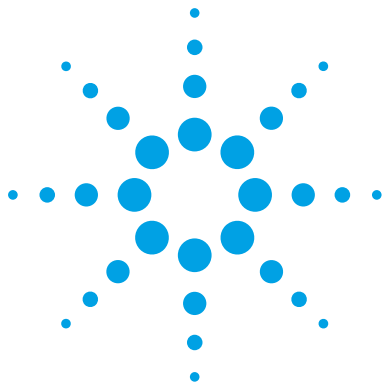
Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
		

Figura 45 Os resultados de Library Search and Generate Formulas para o primeiro pico de espectros.

- 6** Feche o arquivo de dados.
- a** Clique em **File > Close Data File**.
 - b** Clique em **Close**.



3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral 74

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening 79

Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF 83

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise 85

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto 88

Nestas tarefas, você aprende a definir e a executar um método de análise qualitativa. Em seguida, você executa ações no método automatizado quando você abre um arquivo de dados.

Dois diferentes fluxos de trabalho são usados para estes exemplos. Consulte “Fluxos de Trabalho” na página 100 para mais informações.

O fluxo de trabalho General aceita dados do GC/QQQ, GC/Q-TOF e LC/MS. O fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening aceita dados do GC/Q-TOF.

Cada exercício é apresentado em uma tabela com três colunas:

- Passos – Use instruções gerais para proceder por conta própria, explorando o programa.
- Instruções Detalhadas – Utilize-as se você precisar de ajuda ou se preferir um processo de aprendizado passo-a-passo.
- Comentário – Leia-os para obter dicas e informação adicional sobre cada passo no exercício.



3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral

Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral

Quando você iniciar pela primeira vez o programa Análise Qualitativa, o método padrão default.m será carregado. Você pode fazer alterações ao método aberto e salvá-lo, bem como abrir um novo método, fazer alterações e salvar o método. Você não pode sobrescrever o método default.m.

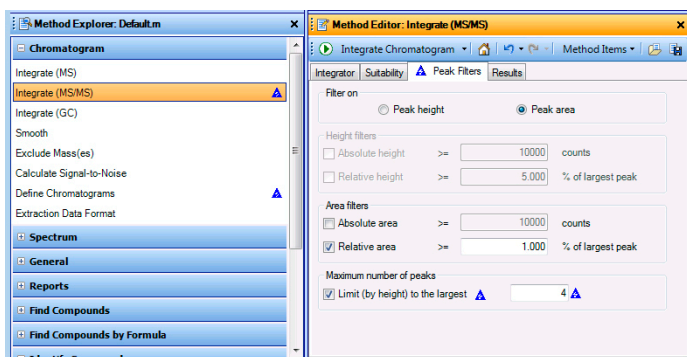
Você também pode definir ações de execução específicas no método quando abrir um arquivo de dados. Quando você abre um arquivo de dados, você também pode carregar o método que foi usado para criar os resultados armazenados no arquivo de dados. Este método é automaticamente salvo quando quer que você salve os resultados com o arquivo de dados. O fluxo de trabalho Geral pode ser usado tanto com os arquivos de dados do GC/MS, quanto do LC/MS.

Tarefa 18. Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho Geral.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Abra o TIC para o arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d .	<ul style="list-style-type: none">a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.b Clique no arquivo de dados Pest - STD 200 MRM.d, na pasta de arquivos de dados de exemplo GC.c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open.	<ul style="list-style-type: none">• Você utiliza ou o Fluxo de Trabalho Geral ou o fluxo de trabalho de Rastreamento de Composto GC/Q-TOF quando trabalha com dados do GC/MS.
2 Configure a interface do usuário para que funcione com os dados do CG.	<ul style="list-style-type: none">• Siga as instruções apresentadas em “Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS” na página 13.	<ul style="list-style-type: none">• Para este exemplo, selecione o fluxo de trabalho Geral.
3 Defina o método para extrair um cromatograma TIC. <ul style="list-style-type: none">• Defina um cromatograma TIC para os dados do MS.	<ul style="list-style-type: none">a Na janela Method Explorer, selecione Chromatogram > Define Chromatograms.b Exclua o cromatograma BPC.c Selecione TIC como o Type.d Tenha certeza de que o Nível MS é MS/MS.e Clique em Add.	


Tarefa 18. Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho Geral.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>4 Edite o método para integrar os dados.</p> <ul style="list-style-type: none"> Limite a integração aos quatro picos mais altos. 	<p>a Na janela Method Explorer, selecione Chromatogram > Integrate (MS/MS)</p> <p>b Clique na aba Peak Filters.</p> <p>c Na seção Maximum number of peaks, marque a caixa de seleção Limit (by height) to the largest.</p> <p>d Tipo 4.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Atualizando um valor na aba Peak Filters, na seção Chromatogram > Integrate (MS), você também atualiza valores em outras seções do Method Explorer. Triângulos azuis parecem exibir estas outras seções.



Você pode clicar no ícone **Save Method** para salvar o método atual.

Figura 46 A aba Chromatogram > Integrate (MS/MS) > Peak Filters tab

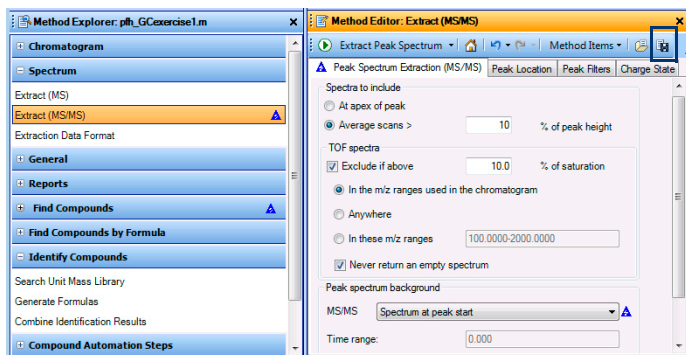
<p>5 Tsete a integração para garantir que apenas 4 picos integrados aparecem.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Clique no ícone Integrate Chromatogram  para integrar o arquivo de dados. 	
<p>6 Salve o método como <i>iii_GCexercise1</i>, onde "iii" são suas iniciais.</p>	<p>a No menu superior, clique em Method > Save As.</p> <p>b Digite <i>iii_GCexercise1</i>.</p> <p>c Clique no botão Salvar.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Observe que salvar o método faz com que os triângulos azuis fazem com que as mudanças de valores no método aberto desapareçam.
<p>7 Altere o plano de fundo do espectro de método para utilizar o espectro no início de um pico.</p>	<p>a Na janela Method Explorer, selecione Spectrum > Extract (MS/MS)</p> <p>b Clique em Peak Spectrum Extraction (MS/MS).</p> <p>c Para o plano de fundo do espectro de Pico, selecione Spectrum at peak start.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você fizer qualquer modificação adicional após salvar o método, então um triângulo azul será adicionado.

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral

Tarefa 18. Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho Geral.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------



Você pode clicar no ícone **Save Method** para salvar o método atual.

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


8 Teste a extração do espectro MS para garantir que um espectro de plano de fundo foi subtraído.


- Clique no ícone **Extract Peak Spectrum** para executar a ação em um pico selecionado, no arquivo de dados.

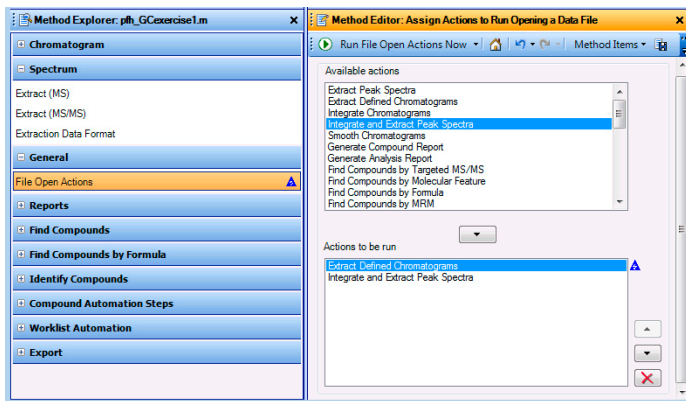
9 Grave o método.

- Salve o método de uma das três seguintes formas:
 - Clique no ícone **Save Method** no Method Editor.
 - Clique com o botão direito no Method Editor, depois, clique em **Save Method**.
 - No menu superior, clique em **Method > Save**.
- O ícone Save Method é exibido em [Figura 47](#) na página 76

Tarefa 18. Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho Geral.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>10 Defina um método para automatizar ações cujos parâmetros você acabou de mudar, quando você abrir um arquivo de dados.</p> <ul style="list-style-type: none"> Liste as ações a serem realizadas quando este ou aquele arquivo de dados for aberto. 	<p>a Na janela Method Explorer, selecione General > File Open Actions.</p> <p>b Selecione Integrate and Extract Peak Spectra da lista Available actions.</p> <p>c Clique no botão Add, , para mover a ação selecionada para a lista Actions to be run. Você também pode clicar duas vezes sobre a ação selecionada para movê-la para a outra lista.</p>	
<p>Dica: Procure em General, no Method Explorer.</p>		

11 Teste as File Open Actions.	<ul style="list-style-type: none"> Clique no ícone Run File Open Actions Now  para executar ações no arquivo de dados. 	<ul style="list-style-type: none"> Os cromatogramas e espectros não são sobrescritos. Novos cromatogramas e espectros são adicionados.
---------------------------------------	---	---



Dois ações diferentes são parte da lista de Ações a serem executadas. A primeira ação é extrair os cromatogramas definidos. Em seguida, o cromatograma será integrado e seus picos, extraídos.

Figura 48 A seção General > File Open Actions no Method Editor

12 Grave o método.	<ul style="list-style-type: none"> Clique no ícone Save Method na janela do Method Editor.
---------------------------	--

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima


Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho geral

Tarefa 18. Defina e execute o método de análise qualitativa usando o fluxo de trabalho Geral.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
13 Defina o método para automatizar as ações quando o método for executado a partir de uma lista de trabalho. <ul style="list-style-type: none">Liste as ações a serem realizadas quando este ou aquele arquivo de dados for aberto.	a Na janela Method Explorer, selecione Worklist Automation > Worklist Actions . b Remova Generate Analysis Report da lista Actions to be run .	

Dica: Olhe sob a Worklist Automation na janela do Method Explorer.

14 Teste as Worklist Actions.

- Clique no ícone **Run Worklist Actions Now**  para executar ações no arquivo de dados.
- Os cromatogramas e espectros não são sobrescritos. Novos cromatogramas e espectros são adicionados.

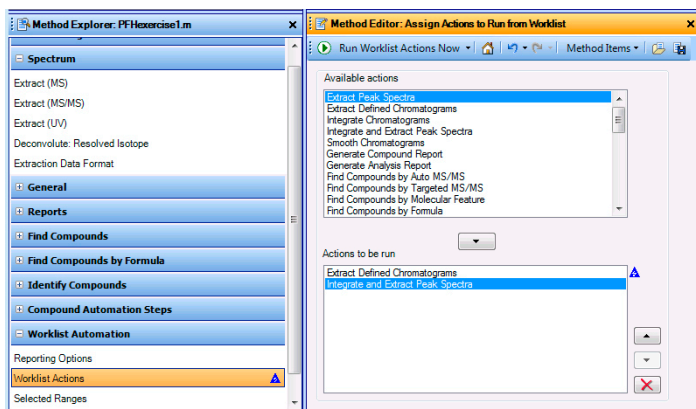


Figura 49 A Worklist Automation > Worklist Actions no Method Editor

15 Salve o método e feche o arquivo de dados sem resultados do processo de salvar.

- Clique no ícone **Save Method** no Method Editor.
- Clique **File > Close Data File** e clique **No** quando for perguntado se os resultados devem ser salvos.

Dois conjuntos de ações diferentes são incluídas em um método. A primeira lista de ações (File Open Actions) pode ser executada quando um arquivo de dados é aberto. A segunda lista de ações (Worklist Actions) é executada quando o método é executado.

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening

Nesta tarefa, você pode definir um método de análise qualitativa que contenha uma lista de ações de análise a serem rodadas em uma ordem específica. Estas incluem a extração e integração de cromatogramas, extração de espectros, busca em uma biblioteca por espectros de pico, geração de fórmulas para espectros e impressão de relatório de análise.

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
1 Abra o TIC para o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none"> a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File. b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC. c Limpe a caixa de seleção Load result data e clique em Open. 	
2 Configure a interface do usuário para que funcione com os dados do CG.	<ul style="list-style-type: none"> • Siga as instruções apresentadas em “Tarefa 2. Configurar Interface de Usuário para dados GC/MS” na página 13. 	<ul style="list-style-type: none"> • Para este exemplo, selecione o fluxo de trabalho do GC/Q-TOF Compound Screening.
3 Certifique-se de que um TIC foi extraído.	<ul style="list-style-type: none"> a Na janela Method Explorer, selecione Chromatogram. b Clique na seção Define Chromatograms. c Na janela Method Editor, verifique se o cromatograma na seção Defined chromatograms é um TIC. Se não for, selecione TIC como Type. Clique no botão Change. 	<ul style="list-style-type: none"> •

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima


Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
4 Revise parâmetros para o algoritmo Find by Chromatogram Deconvolution.	<ul style="list-style-type: none">a Clique na seção GC/Q-TOF Compound Screening > Find by Chromatogram Deconvolution na janela Method Explorer.b Clique na aba Mass Filter.c Defina o valor Absolute height a 13000.d Clique na aba Results.e Clique no botão Highlight all compounds.f Reveja os resultados em cada aba.	<ul style="list-style-type: none">• Procure nas seções pelo fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening.• Observe as seis seções neste fluxo de trabalho. Todas as seções são réplicas de seções que já são parte do explorador de método.• Observe que os triângulos azuis aparecem em outras seções do Method Explorer. Isto indica que os mesmos valores de parâmetros foram alterados em outro lugar também.
5 Revise parâmetros para o algoritmo Library Search.	<ul style="list-style-type: none">a Clique na seção GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by library search na janela Method Explorer.b Clique sobre o botão Add Library. Selecione uma biblioteca e clique em Open.c (opcional) Clique no botão Remove Library para remover uma biblioteca, se você não quiser usá-la.d Reveja os parâmetros em cada aba.	<ul style="list-style-type: none">• Ou a demo.l library ou a NIST08.l (ou outra versão da biblioteca NIST) está instalada na pasta \MassHunter\Library.
6 Salve o método como <i>iii</i> _GCexercise2, onde " <i>iii</i> " são suas iniciais.	<ul style="list-style-type: none">a No menu superior, clique em Method > Save As.b Digite <i>iii</i>_GCexercise2.c Clique no botão Salvar.	

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening.

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>7 Defina um método para automatizar as ações quando um arquivo de dados for aberto.</p> <ul style="list-style-type: none"> Liste as ações a serem realizadas quando este ou aquele arquivo de dados for aberto. <p>Dica: Olhe sob General na janela Method Explorer.</p>	<ul style="list-style-type: none"> a Na janela Method Explorer, selecione General > File Open Actions. b Remova Generate Analysis Report da lista Actions to be run. c Remova Integrate and Extract Peak Spectra. d Remova todas as outras ações da lista. e Adicione Extract Defined Chromatograms. f Adicione Find Compounds by Chromatographic Deconvolution. g Adicione Search Spectral Library for Compound. 	
<p>8 Teste as File Open Actions.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Clique no ícone Run 'File Open' Actions Now  para executar as ações a partir do arquivo de dados. 	<ul style="list-style-type: none"> Os cromatogramas e espectros não são sobrescritos. Novos cromatogramas e espectros são adicionados.

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening

Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening.

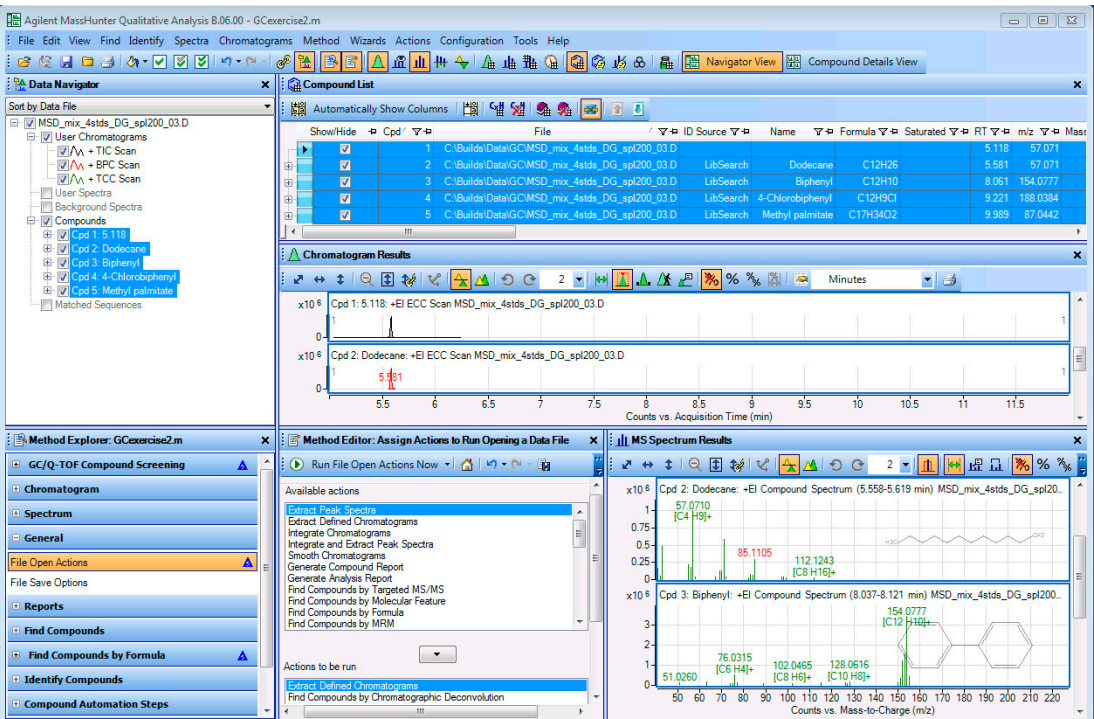
Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários																																													
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 - GCExercise2.m interface. It shows a workflow for GC/Q-TOF Compound Screening. The Compound List table contains the following data:</p> <table border="1"><thead><tr><th>File</th><th>ID</th><th>Source</th><th>Name</th><th>Formula</th><th>Saturated</th><th>RT</th><th>m/z</th><th>Mass</th></tr></thead><tbody><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>1</td><td>LibSearch</td><td>Dodecane</td><td>C12H26</td><td></td><td>5.118</td><td>57.071</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>2</td><td>LibSearch</td><td>Biphenyl</td><td>C12H10</td><td></td><td>8.061</td><td>154.077</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>4</td><td>LibSearch</td><td>4-Chlorobiphenyl</td><td>C12H9Cl</td><td></td><td>9.221</td><td>188.034</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>5</td><td>LibSearch</td><td>Methyl palmitate</td><td>C17H34O2</td><td></td><td>9.989</td><td>87.042</td><td></td></tr></tbody></table> <p>The Chromatogram Results panel shows two traces: 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. The MS Spectrum Results panel shows two spectra: Cpd 2: Dodecane: +EI Compound Spectrum (5.558-5.619 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D and Cpd 3: Biphenyl: +EI Compound Spectrum (8.037-8.121 min) MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D. The MS spectrum for Biphenyl shows peaks at m/z 57.0710 [C4 H9]+, 85.1105, 112.1243 [C8 H16]+, 154.0777 [C12 H10]+, 76.0315 [C6 H4]+, 102.0465 [C8 H6]+, and 128.0616 [C10 H9]+. The chemical structures for Dodecane and Biphenyl are also shown.</p>	File	ID	Source	Name	Formula	Saturated	RT	m/z	Mass	C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	1	LibSearch	Dodecane	C12H26		5.118	57.071		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	2	LibSearch	Biphenyl	C12H10		8.061	154.077		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	4	LibSearch	4-Chlorobiphenyl	C12H9Cl		9.221	188.034		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	5	LibSearch	Methyl palmitate	C17H34O2		9.989	87.042		
File	ID	Source	Name	Formula	Saturated	RT	m/z	Mass																																							
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	1	LibSearch	Dodecane	C12H26		5.118	57.071																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	2	LibSearch	Biphenyl	C12H10		8.061	154.077																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	4	LibSearch	4-Chlorobiphenyl	C12H9Cl		9.221	188.034																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	5	LibSearch	Methyl palmitate	C17H34O2		9.989	87.042																																								

Figura 50 Resultados das ações da lista de trabalho em execução nos dados do GC/Q-TOF.

- 9 Salve o método como *iii_GCExercise2*, onde "*iii*" são suas iniciais.
- a No menu, clique em **Method > Save**
 - b Digite *iii_GCExercise2*.
 - c Clique em **Save**.
- Se este método estiver rodando durante uma lista de trabalho de Aquisição de Dados, então as Worklist Actions nesta aba são executadas em uma ordem dada.

- 10 Feche o arquivo de dados sem salvar os resultados.
- a Clique em **File > Close Data File**.
 - b Clique em **No** quando solicitado se os resultados devem ser salvos.

Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF

Você pode exportar um arquivo CEF contendo informações do composto. Este arquivo CEF pode ser importado para outros programas, como o MassHunter Quantitative Analysis ou o Mass Profiler Professional. Você também pode importar compostos que foram exportados em um arquivo CEF.

Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Abra o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d e execute as ações File Open para o método <i>iii_GCexercise2.m</i>, que foi criado em “Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening” na página 79.</p>	<p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC.</p> <p>c Limpe a caixa de marcação Load result data.</p> <p>d Marque a caixa de marcação Run ‘File Open’ actions from selected method.</p> <p>e Clique no botão Use current method e, em seguida, clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você finalizou “Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening” na página 79, o método atual deve ser <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método está configurado para executar o algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e, em seguida, rodar o algoritmo Search Library em cada composto.
<p>2 Exporte um arquivo CEF.</p>	<p>a Para exportar o arquivo de modo interativo, clique em File > Export > as CEF.</p> <p>b Clique no botão All results.</p> <p>c Selecione o local de exportação do arquivo.</p> <p>d Clique em OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Um arquivo CEF é usado para exportar compostos.

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF

Tarefa 20. Exporte um arquivo CEF (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

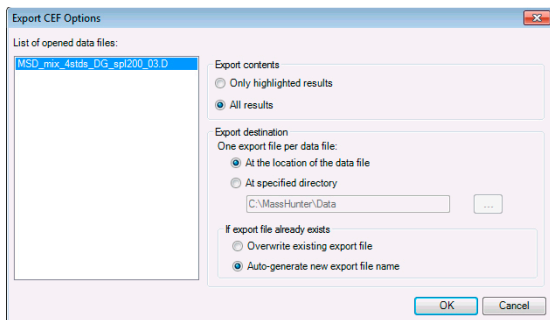


Figura 51 Caixa de diálogo Export CEF Options.

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise

Quando você quiser imprimir um relatório de análise após realizar qualquer uma das tarefas neste exercício ou no seguinte, utilize as seguintes instruções.

Um relatório de análise pode conter os resultados da extração e integração de cromatogramas, extração de espectros, busca de composto, busca em um banco de dados por espectros de pico ou geração de fórmulas a partir de espectros de pico.

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Se o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d não for carregado, então abra este arquivo de dados e rode a ação File Open para o método <i>iii_GCexercise2.m</i>, que foi criado em "Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening" na página 79.</p>	<p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC.</p> <p>c Limpe a caixa de marcação Load result data.</p> <p>d Marque a caixa de marcação Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Clique no botão Use current method e, em seguida, clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Se você finalizou "Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening" na página 79, o método atual deve ser <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método está configurado para executar o algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e, em seguida, rodar o algoritmo Search Library em cada composto.
<p>2 Altere as seleções do relatório de análise no método:</p> <ul style="list-style-type: none"> Marque as caixas de marcação para os cromatogramas, espectros ou tabelas que você gostaria de imprimir. Limpe as caixas de marcação para os cromatogramas, espectros ou tabelas que você gostaria de imprimir. 	<p>a Na janela Method Explorer, selecione Reports > Analysis Report.</p> <p>b Marque as caixas de marcação para quaisquer seleções adicionais que você queira imprimir.</p> <p>c Limpe qualquer cromatograma ou escolha de espectros que você não queira imprimir.</p>	<ul style="list-style-type: none"> O relatório Analysis contém as informações que você marcou nesta seção. Se alguns resultados não estiverem disponíveis, escolha resultados não incluídos, mesmo que estes resultados sejam marcados na seção. Por exemplo, se você não integrou o cromatograma, então a tabela de pico não será incluída.

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise (cont.)

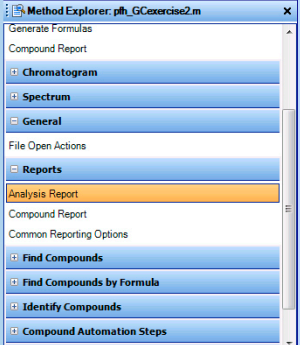
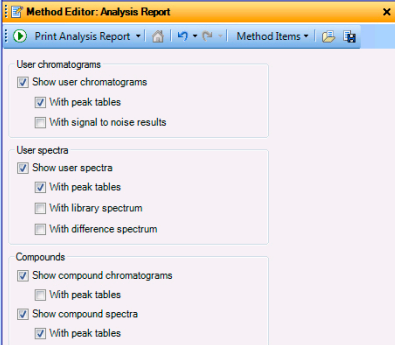


Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
		<p>Por definição, a janela Method Editor estará flutuando. Ela estará visível como uma janela separada do restante do programa Qualitative Analysis. Para imobilizar a janela, clique com o botão direito sobre ela e, em seguida, clique em Floating. Você também pode clicar duas vezes sobre a barra de título para imobilizar a janela.</p>

Figura 52 A seção Analysis Report, no Method Explorer e Method Editor

3 Imprima o relatório.

- a Você pode imprimir interativamente o relatório de múltiplas maneiras.
 - A partir do menu principal, clique em **File > Print > Analysis Report**.
 - A partir da barra de ferramentas principal, clique no ícone Printer.
 - Clique no ícone **Print Analysis Report**,  na barra de ferramentas Method Editor quando a seção Relatório de Análise for selecionada.
 - Clique com o botão direito sobre a seção Relatório de Análise, no Method Editor, em seguida, clique em **Print Analysis Report**.
 - A partir do menu de atalhos do arquivo de dados, em Data Navigator, clique em **Analysis Report**.
 - b Clique em **Report contents**.
 - c Marque a caixa de marcação **Print report** e selecione uma impressora.
 - d Marque a caixa de marcação **Print preview**.
 - e Clique sobre o botão **OK**.
- O ícone Run  , na barra de ferramentas do Method Editor, às vezes permite que você escolha uma ação a partir de um conjunto de ações possíveis. Por exemplo, se você alterar para a seção Reports > Common Reporting Options da janela Method Editor, quatro diferentes ações serão possíveis quando você clicar sobre o ícone Executar. Se você clicar sobre a seta, uma lista de ações possíveis será exibida, e você pode escolher que ação executar. Escolher uma ação diferente da lista, modifica a ação padrão. Se você simplesmente clicar sobre o botão Run, a ação padrão atual será realizada.

Tarefa 21. Imprima um relatório de análise (cont.)

Etapas	Instruções Detalhadas	Comentários
--------	-----------------------	-------------

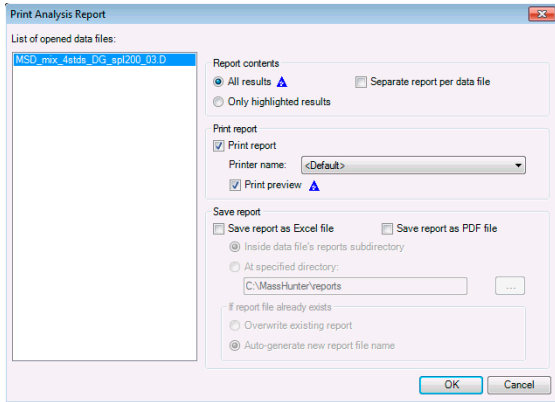


Figura 53 Caixa de diálogo Print Analysis Report

- f Rever o relatório.
- g Clique sobre o ícone **Close Print Preview** na barra de ferramentas.

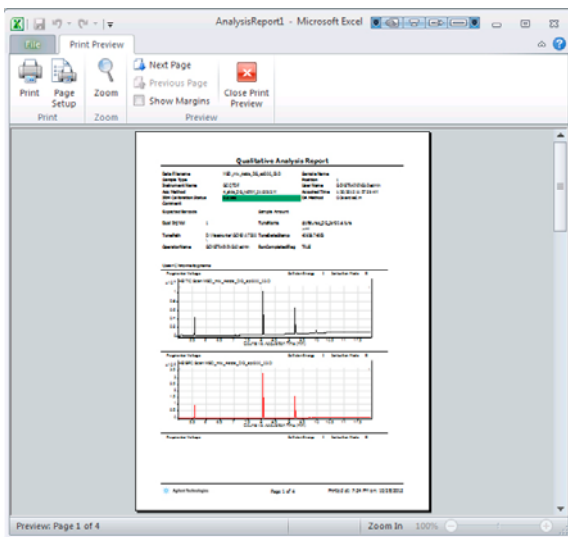


Figura 54 Imprima a janela de pré-visualização com o relatório de análise

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

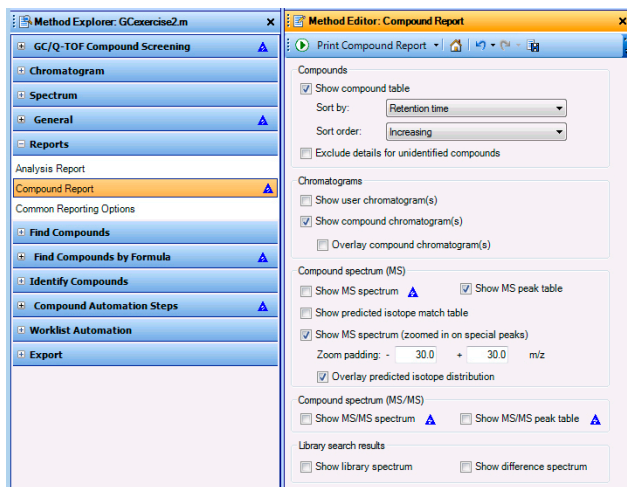
Quando você quer imprimir um relatório de composto, utilize estas instruções.

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
<p>1 Se o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d não for carregado, então abra este arquivo de dados e rode a ação File Open para o método <i>iii_GCexercise2.m</i>, que foi criado em "Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening" na página 79.</p>	<p>a Se o programa não estiver aberto, clique duas vezes no ícone Mass Hunter Qualitative Analysis. Do contrário, clique em File > Open Data File.</p> <p>b Clique sobre o arquivo de dados MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d na pasta de arquivo de dados GC.</p> <p>c Limpe a caixa de marcação Load result data.</p> <p>d Marque a caixa de marcação Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Clique no botão Use current method e, em seguida, clique em Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">Se você finalizou "Tarefa 19. Defina e execute um método utilizando o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening" na página 79, o método atual deve ser <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método está configurado para executar o algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution e, em seguida, rodar o algoritmo Search Library em cada composto.
<p>2 Modifique algumas das seleções no método para relatórios de compostos:</p> <ul style="list-style-type: none">Desligue a visualização do espectro MS com zoom em picos especiais.Desligue as opções do MS/MS no relatório.	<p>a Em Method Explorer, clique sobre Reports > Compound Report.</p> <p>b Limpe a caixa de marcação Show MS spectrum.</p> <p>c Limpe a caixa de marcação Show MS/MS spectrum.</p> <p>d Limpe a caixa de marcação Show MS/MS peak table.</p>	<ul style="list-style-type: none">Estas caixas de marcação permitem que você especifique quais informações incluir em um relatório quando ele estiver disponível. Se a informação não estiver disponível, a seção será ignorada automaticamente. Por exemplo, os resultados MS/MS nunca são incluídas quando os arquivos de dados apenas tem dados MS.

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

Etapa	Instruções Detalhadas	Comentários
-------	-----------------------	-------------



A caixa de marcação dos cromatogramas de composto Overlay devem ser limpas para os dados GC/Q-TOF.

Figura 55 A seção Compound Report no Method Editor

- 3** (opcional) Escolha uma exibição de relatório de composto diferente.
- a** Na janela Method Explorer, selecione **Reports > Common Reporting Options**.
 - b** Selecione **CompoundReportWithIdentificationHits.xlsx** como o template de relatório de Composto.
- Vários diferentes templates de relatórios são incluídos no software.
 - Você pode customizar o template usando o Excel ou a extensão Report Designer.

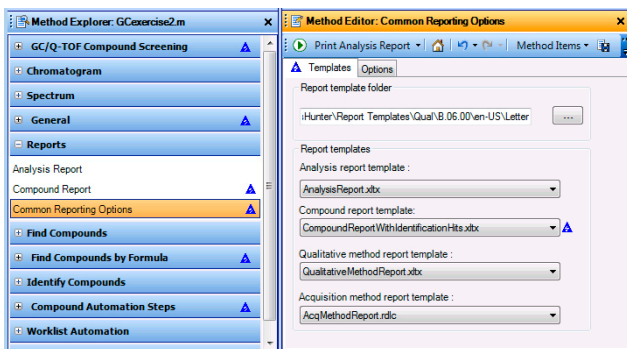


Figura 56 Opções de Relatório Comuns no Editor de Método

Você pode usar o Excel e a extensão Report Designer para customizar qualquer template que tenha a extensão XLTX. Você não pode customizar o relatório de método de aquisição.

3 Utilize fluxos de trabalho, exporte e imprima


Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

Tarefa 22. Imprima um relatório de composto

Etapa

4 Imprima o relatório.

Instruções Detalhadas

- a Clique em **File > Print > Compound Report** ou clique na seta do ícone **Print Analysis Report**  e clique em **Print Compound Report** para imprimir o relatório de composto.
- b Marque a caixa de marcação **Print preview**.
- c Clique em **OK**. Examine o relatório.
- d Clique no ícone **Close Print Preview**.

Comentários

- Na caixa de diálogo Print Compound Report, você pode selecionar uma impressora diferente, escolher salvar o relatório como um arquivo PDF ou Excel, selecionar se quer imprimir todos os resultados ou apenas os destacados e se quer ou não combinar diferentes arquivos de dados em um único relatório.
- Consulte a Ajuda online ou o DVD de Treinamento em Design de RElatórios para informações adicionais.

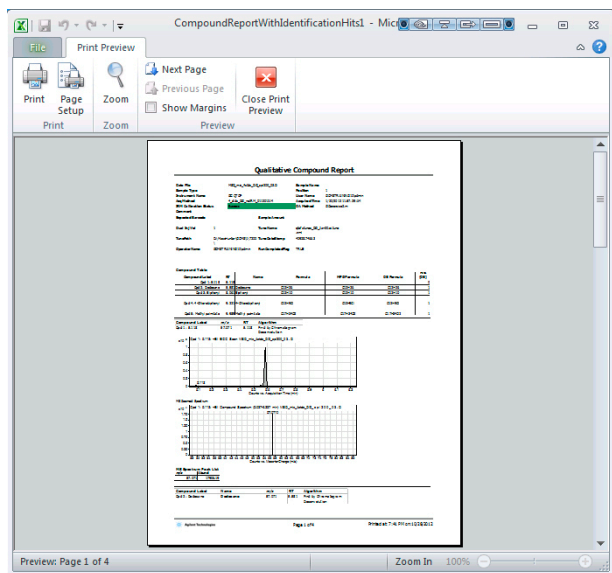
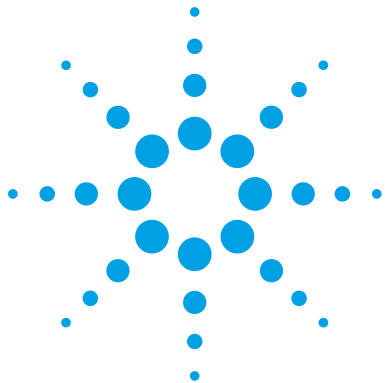


Figura 57 Imprima a janela de pré-visualização com o relatório de composto.

5 Feche o arquivo de dados sem salvar os resultados.

- a Clique em **File > Close Data File**.
- b Clique em **No** quando lhe for perguntado se você gostaria de salvar os resultados.



Referência

Trabalhe com Janelas	92
Trabalhe com os dados de resultado em Data Navigator	95
Realize operações do cromatograma	96
Realize operações em um espectro MS ou MS/MS	97
Trabalhe com dados visuais cromatográficos	98
Trabalhe com dados visuais espectrais	99
Fluxos de Trabalho	100
Customize uma exibição de relatório	105



Trabalhe com Janelas

Quando você abre o programa Análise Qualitativa, você vê quatro janelas na exibição padrão: Data Navigator, Method Explorer, Chromatogram Results e MS Spectrum Results. Você pode alterar entre Navigator View e Compound Details View.

Você pode trazer até dezessete novas janelas para a Navigation View utilizando o menu View:

- Method Editor - permite que você edite parâmetros de método separados em diferentes abas
- Spectrum Preview - permite que você rastreie rapidamente os espectros em um arquivo de dados
- MS Spectrum Results - exibe o MS e os espectros de MS/MS
- Difference Results - exibe os resultados de diferença após uma busca na biblioteca
- Deconvolution Results - exibe os espectros de deconvolução
- Deconvolution Mirror Plot - exibe dois espectros em deconvolução em uma imagem de reprodução
- UV Spectrum Results - exibe os espectros UV - apenas disponível para dados de LC/MS.
- Integration Peak List - exibe os resultados da integração em uma tabela
- MS Spectrum Peak List 1 - exibe a tabela de picos para o primeiro espectro selecionado
- MS Spectrum Peak List 2 - exibe a tabela de picos para o segundo espectro selecionado
- MS Actuals - exibe informações de aquisição para o espectro destacado
- Compound List - exibe os compostos encontrados utilizando-se um dos algoritmos de Encontrar Compostos
- Compound Identification Results - exibe a informação de identificação para o composto selecionado
- Spectrum Identification Results - exibe a informação de identificação para o espectro selecionado
- MS/MS Formula Details - exibe uma tabela que contém possíveis fórmulas calculadas para fragmentos vistos em um espectro MS/MS

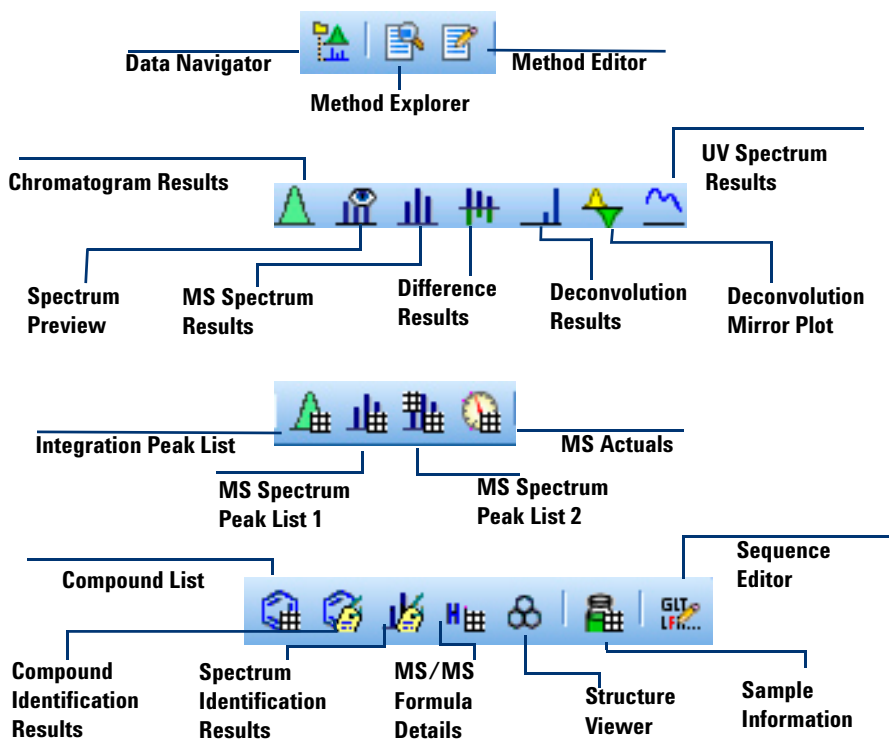
- Structure Viewer - exibe a estrutura associada com o composto atual ou espectro
- Sample Information - exibe informações sobre o arquivo de dados destacado
- Sequence Editor - sempre permite que você edite uma sequência de método

Você também pode exibir três janelas de ferramentas que são exibidas quando você começa utilizando a ferramenta associada:

- Formula Calculator
- Mass Calculator
- Recalibrate

Window Icons na Barra de Ferramentas Principal

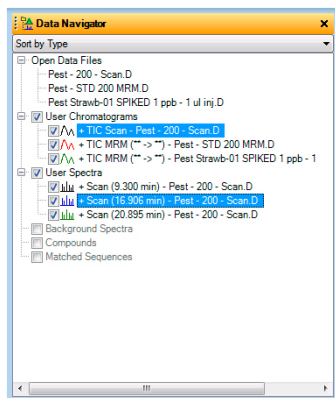
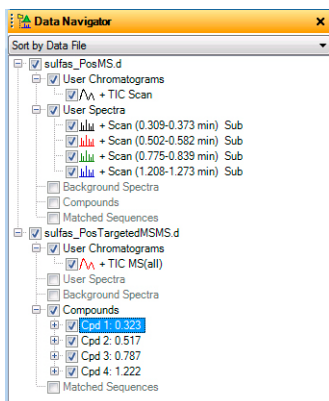
Você abre e fecha as janelas com estes ícones na barra de ferramentas principal. Ícones adicionais estarão disponíveis quando o software MassHunter BioConfirm estiver instalado. Comandos no menu de Visualização também podem ser usados para abrir estas janelas.



Trabalhe com os dados de resultado em Data Navigator

Janela e ferramentas em Data Navigator

O Data Navigator organiza todos os resultados de extração e de seleção de espectro tanto por arquivo de dados quanto por tipo de dados.



Linked Navigation Icon

Quando ativado (padrão), destacar um cromatograma no Navegador de Dados também destaca os espectros correspondentes. Os resultados do cromatograma e gráfico de espectros correspondentes também são destacados. Linked Navigation apenas funciona se você utilizou o item do menu Extract Peak Spectra no Menu Chromatograms ou se você rodou algum dos algoritmos de Compounds.



Check Mark Tools

Single check mark – Marca as caixas de marcação de todos os dados destacados.

Dual check marks, one gray – Marca as caixas de marcação dos dados destacados e limpa as demais caixas de marcação.

Dual check marks – Marca todas as caixas de marcação.

Os cromatogramas e espectros são exibidos quando as caixas de marcação são marcadas.


Realize operações do cromatograma

Você pode realizar as seguintes operações em todo o cromatograma ou em uma região selecionada do cromatograma utilizando os itens do menu:


Action	Item do Menu
Altere a classificação de pico no cromatograma	Configuration > Chromatogram Display Options
Extraia um cromatograma	Chromatograms > Extract Chromatograms
Extraia cromatogramas definidos	Chromatograms > Extract Defined Chromatograms
Integre o cromatograma	Chromatograms > Integrate Chromatogram
Integre e extraia o espectro do pico	Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra
Integre e realize a deconvolução do espectro do pico	Chromatograms > Integrate and Deconvolute Peak Spectra
Suavize o cromatograma	Chromatograms > Smooth Chromatogram
Subtraia qualquer cromatograma	Chromatograms > Subtract Any Chromatogram
Calcule a relação sinal-ruído	Chromatograms > Calculate Signal-to-Noise
Encontre compostos a partir dos dados do MS/MS automático	Find > Find Compounds by Auto MS/MS
Encontre compostos a partir dos dados do MS/MS-alvo	Find > Find Compounds by Targeted MS/MS
Encontre compostos para os dados do MS(1)	Find > Find Compounds by Molecular Feature
Encontre compostos para os dados do CG/MS	Find > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution
Encontrar compostos por dados do MRM	Find > Find Compounds by MRM
Encontrar compostos por resultados de integração	Find > Find Compounds by Integration
Encontrar compostos que atendam a fórmulas específicas	Find > Find Compounds by Formula

Selecionar operações de amplitude a partir do menu de atalhos

Quando você tiver selecionado a amplitude cromatográfica, você poderá também extrair um espectro e extrair um espectro para o plano de fundo, além de realizar as operações mencionadas acima e de outras não mencionadas.

- 1 Para acessar essas operações, clique na ferramenta Range Select () na barra de ferramentas de Chromatograms Results.
- 2 Clique no ponto em que você quer que a amplitude seja iniciada, arraste o cursor sobre uma amplitude e, em seguida, solte o botão do mouse.
- 3 Clique com o botão direito sobre qualquer cromatograma e clique na operação a partir do menu de atalhos.

Salve os resultados no(s) arquivo(s) de dados

- Clique no ícone **Save** () , ou clique em **File > Save Results**.

Quando você sair do programa, ele também lhe perguntará se você quer salvar os resultados no arquivo de dados, a não ser que você tenha desativado esta função (você desativa a função na caixa de diálogo das Opções da Caixa de Mensagens).

Realize operações em um espectro MS ou MS/MS

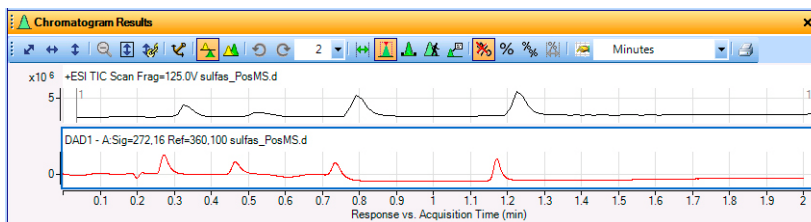
Você pode realizar as seguintes operações em um espectro MS ou MS/MS ou em uma região selecionada de um espectro MS ou MS/MS utilizando os seguintes itens do menu:

Action	Item do Menu
Visualize m/z, abundância, estado de carga e outras informações sobre picos em um espectro	View > MS Spectrum Peak List 1
Modifique as classificações de pico espectral	Configuration > MS and MS/MS Spectra Display Options
Subtraia o espectro do plano de fundo	Spectra > Subtract Background Spectrum
Subtraia qualquer espectro	Spectra > Subtract Any Spectrum (and then click another spectrum)
Adicione dois espectros juntos	Spectra > Add Any Spectrum (and then click another spectrum)

Action	Item do Menu
Busque em um banco de dados por entradas que correspondam a massas específicas em um espectro	Spectra > Search Database for Spectrum Peaks
Gere fórmulas para as massas na amplitude selecionada em um espectro	Spectra > Generate Formulas from Spectrum Peaks (when a range is selected in the MS spectrum)
Realize a deconvolução utilizando o algoritmo Resolved Isotope	Spectra > Deconvolute (Resolved Isotope)
Busque na Biblioteca	Identify > Search Library for Spectra ou Spectra > Search Library for Spectra

Trabalhe com dados visuais cromatográficos

Chromatogram Results Window



Chromatogram Results Tools

Ferramentas de Zoom em ordem



Ferramentas Seleccionadas em ordem



Uma dessas ferramentas sempre estará seleccionada.

Autoescala para Eixo-X e Eixo-Y

Autoescala para Eixo-X

Autoescala para Eixo-Y

Diminuir zoom

Autoescala para Eixo-Y com Zoom

Modo de Eixo-Y Conectado

Range Select – Quando **On**, você pode estipular uma amplitude para o cromatograma, por meio da qual você pode realizar ações.

Peak Select – Quando **On**, você pode seleccionar um espectro de um pico integrado no ápice.

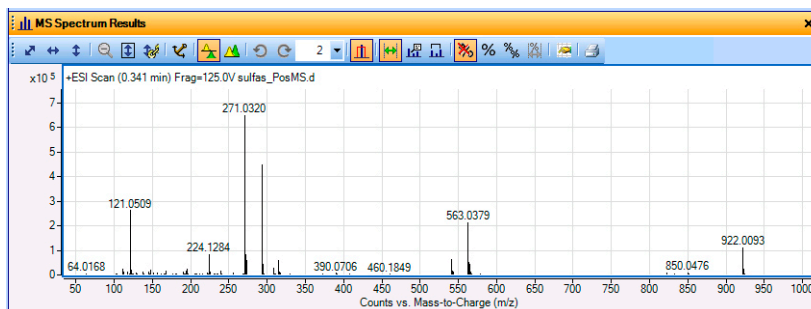
Manual Integration – Quando **On**, você pode integrar interativamente.

Walk Chromatogram – Quando **On**, você pode visualizar espectros individuais enquanto clica em cada ponto ou usar as teclas seta-esquerda ou seta-direita do teclado.

Annotation – Quando **On**, você pode adicionar uma imagem e anotações em texto aos cromatogramas.

Trabalhe com dados visuais espectrais

Janela de Resultados de Espectro MS



Ferramentas de Resultados de Espectro MS

Ferramentas de Zoom em ordem



Autoescala para Eixo-X e Eixo-Y

Autoescala para Eixo-X

Autoescala para Eixo-Y

Diminuir zoom

Autoescala para Eixo-Y com Zoom

Modo de Eixo-Y Conectado

Ferramentas Seleccionadas em ordem



Para limpar uma seleção de ferramenta, clique em outra ferramenta ou ícone.

Range Select – Quando **On**, você pode estipular uma amplitude para o cromatograma, por meio da qual você pode realizar ações.

Annotation – Quando **On**, você pode adicionar uma imagem e anotações em texto aos cromatogramas.

Calipers – Quando **On**, você pode adicionar um compasso de Massa Delta ao espectro selecionado. Na janela Deconvolution Results, você pode adicionar um compasso de Aminoácido ou um compasso de Modificações. Consulte a Ajuda online para mais informações.

Fluxos de Trabalho

Os fluxos de trabalho ajudam você a customizar a interface de usuário para seu aplicativo. Cada fluxo de trabalho carrega um método diferente que tem parâmetros que são apropriados para aquele fluxo de trabalho. Além disso, cada fluxo de trabalho carrega um layout diferente; estes layouts incluem a customização das colunas exibidas em cada tabela. Por último, quatro dos layouts também adicionam uma seção de editor de método especial que contém cópias das seleções do editor de método que são importantes para aquele fluxo de trabalho. Agrupar as configurações que são usadas em um fluxo de trabalho específico faz com que seja mais fácil que você customize seu método.

Vários fluxos de trabalhos distintos estão disponíveis no programa de Análise Qualitativa. São eles:

- Geral

- BioConfirm - Estes fluxos de trabalho só estão disponíveis se o software BioConfirm for instalado e marcado na caixa de diálogo User Interface Configuration. BioConfirm conta com vários fluxos de trabalho possíveis, dependendo do tipo de análise que você gostaria de fazer. BioConfirm é usado com arquivos de dados LC/MS.
- Chromatogram Peak Survey
- Formula Confirmation e Sample Purity
- MS Target Compound Screening
- Rastreamento de Composto do CG/Q-TOF

Se você está trabalhando com dados do CG/MS, você pode selecionar o fluxo de trabalho General ou o fluxo de trabalho GC/Q-TOF Compound Screening. Se você está trabalhando com dados do LC/MS, você pode selecionar qualquer fluxo de trabalho exceto o GC Q-TOF Compound Screening.

Specific Method

Cada fluxo de trabalho carrega um método padrão específico com configurações apropriadas para aquele fluxo de trabalho. Por exemplo, se você alternar para um dos fluxos de trabalho BioConfirm, o **Target data type** para o algoritmo Find Compounds by Molecular Feature é definido como **Large molecules (proteins, oligos)**. Esta configuração é apropriada para o fluxo de trabalho BioConfirm, mas não, por padrão, para outros fluxos de trabalho.

Layout Específico:

Além disso, cada fluxo de trabalho carrega um layout específico. Um layout consiste no seguinte:

- Posição e tamanho de cada janela
- Quais janelas possuem abas
- Quais janelas estão flutuando
- Qual janela com aba está no topo
- Quais janelas são visíveis por definição
- Se a barra de status está visível

Para cada janela de gráfico (a janela de Resultados do Cromatograma, a janela de Previsão do Espectro, a janela de Resultados do Espectro MS, a janela de Deconvolução e a janela de Resultados UV), as seguintes informações são salvas:

- Se os gráficos estão sobrepostos ou não
- Se a Autoescala do Eixo-Y durante o modo zoom está ligada ou não
- Se a Autoescala do Eixo-Y está ligada ou não

Para cada janela de tabela, as seguintes informações são salvas:

- Quais colunas estão visíveis
- A ordem das colunas
- A largura de cada coluna
- Qualquer filtro que tenha sido adicionado à tabela (apenas disponível para a tabela de Lista de Compostos, a tabela e Resultados de Identificação de Compostos e a janela de Resultados de Identificação de Espectro).

Seção específica do Explorador de Método e do Editor de Método

Utilizando o Editor de Método com o fluxo de trabalho Geral, você pode alterar quase todos os parâmetros no Método.

Cada um dos outros quatro fluxos de trabalhos altera as seções disponíveis no Explorador de Método. Cada seção nova contém apenas as abas do Editor de Método e seções que são úteis no fluxo de trabalho. Alterar um parâmetro na seção de fluxo de trabalho também altera o parâmetro na seção correspondente das seções de Editor de Método gerais.

Duas abas não são repetidas nas seções do Editor de Método gerais. A seção **Identificação de Pico de Espectro >do Fluxo de Trabalho da Pesquisa de Pico do Cromatograma** e as abas **Fluxo de Trabalho da Pesquisa de Pico do Cromatograma> Extração do Cromatograma > Cromatogramas** estão incluídas apenas no fluxo de trabalho da Pesquisa de Pico do Cromatograma. Estas seções afetam apenas o algoritmo de Pesquisa de Pico do Cromatograma. Este algoritmo é usado apenas neste fluxo de trabalho, e na ação **Pesquisa de Pico do Cromatograma sem Relatório**, bem como na ação **Pesquisa de Pico do Cromatograma com Relatório de Análise**.

Métodos de fluxo de trabalho e layouts

Métodos-padrão adicionais e layouts são oferecidos para cada fluxo de trabalho:

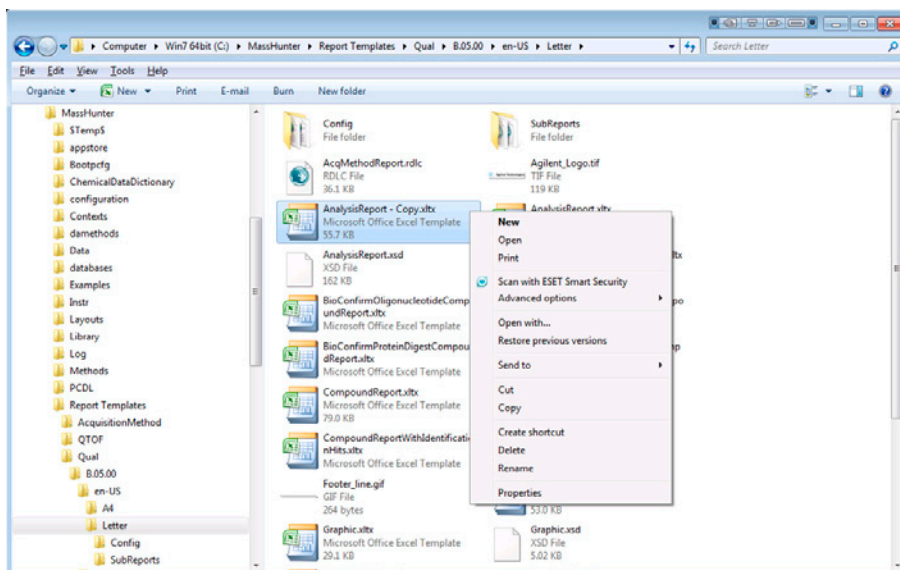
Fluxo de Trabalho	Método	Layout	Seção do Editor de Método
Geral	default.m	Default.xml	Nenhuma
Proteína Intacta BioConfirm	BioConfirm IntactProtein- Default.m	BioConfirm- IntactProtein- MaximumEntropy- Default.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm High Mass Intact Protein	BioConfirm IntactProtein HighMass 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

Fluxo de Trabalho	Método	Layout	Seção do Editor de Método
Formula Confirmation e Sample Purity	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Confirmação de Fórmula e Fluxo de Trabalho de Pureza da Amostra
MS Target Compound Screening	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	Fluxo de Trabalho do Rastreamento do Composto-alvo do MS
Rastreamento de Composto Q-TOF do CG	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	Rastreamento de Composto do CG/Q-TOF

Customize uma exibição de relatório

Por favor, consulte a Ajuda online para o Aplicativo de Design de Relatórios do MassHunter, o Guia de Familiarização com Design de Relatórios ou o DVD de Treinamento em Relatórios para informações detalhadas sobre exibições de relatório. Os seguintes passos dão a você noções sobre o que significa customizar uma exibição.

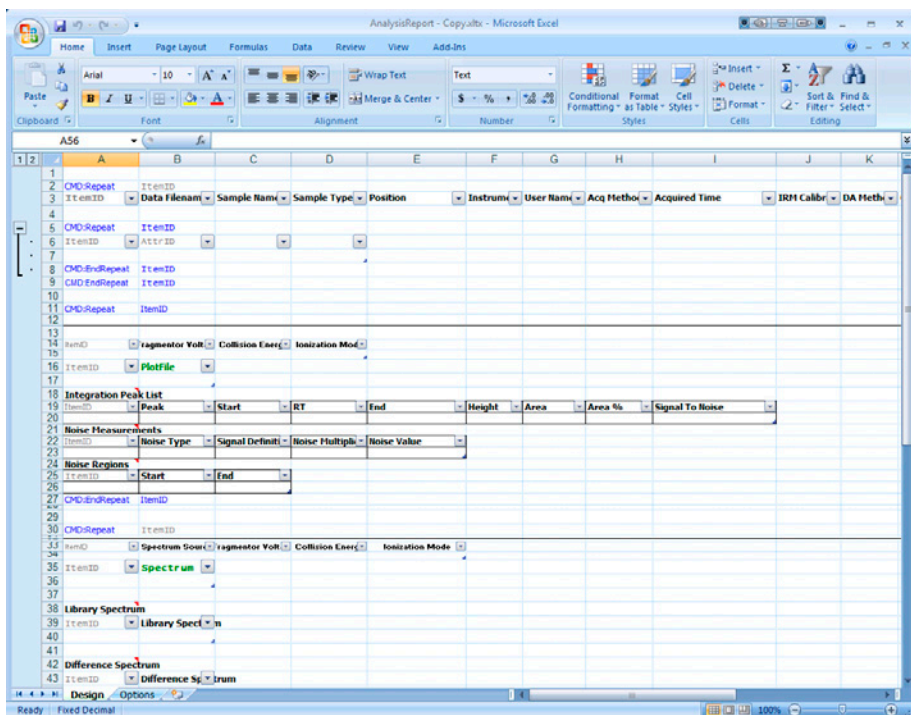
- 1 Vá até a pasta que contém as exibições de relatório. Por padrão, a pasta é: **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter**. Você pode selecionar uma pasta diferente no Explorador de Método, na aba Exibições do > Opções Comuns de Relatórios>.
- 2 Faça uma cópia da exibição que você gostaria de modificar. Clique com o botão direito sobre a cópia e clique em **Propriedades**. Se necessário, limpe a caixa de marcação **Somente Leitura**. Em seguida, clique com o botão direito sobre a cópia e clique em **Abrir** no menu de atalhos.



Abrir a exibição deste modo permite que o Excel saiba que este arquivo é um arquivo de exibição. Quando a exibição estiver aberta, você pode modificar os cabeçalhos e notas de rodapé e adicionar, remover ou mover colunas de parâmetros. Consulte a Ajuda online para mais informações. Todas as exibições de Análise Qualitativa são marcadas como Somente Leitura. Você pode mudar esta propriedade antes de editar a exibição.

Customize uma exibição de relatório

Muitas exibições são instaladas com o programa de Análise Qualitativa. Consulte a Ajuda online da Análise Qualitativa para mais informações sobre o conteúdo de cada exibição de relatório.



- 3 Faça as modificações que você quer fazer.
Para mais informações sobre como alterar uma exibição, consulte ou a Ajuda online do aplicativo de Design de Relatórios do MassHunter, ou o *DVD de Treinamento de Relatório do MassHunter Agilent*.
- 4 Para salvar uma exibição nova, clique em **Save** ou clique em **Save As > Other Formats** no botão do Microsoft Office.
- 5 Digite um nome de indentificação e clique em **Save**.

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

www.agilent.com

Neste livro

Este guia contém informações sobre como usar o Agilent MassHunter Workstation Software - Qualitative Analysis with GC/MS data.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Revisão A, novembro de 2012



G3335-98147



Agilent Technologies