

PREENCHIMENTO DA PLANILHA SAMPLE_ID

COM OS RESULTADOS DO AMDIS VOCE MONTARÁ A PLANILHA.

RESULTADOS NO AMDIS.

NOME DO ARQUIVO DA AMOSTRA NO XCALIBUR.

TEMPO DE RETENÇÃO (RT)

INDICE DE RETENÇÃO (RI)

TIPOS DE NOMES DOS COMPOSTOS.

LMV1404.pdf - Adobe Acrobat Reader DC (32-bit)

Arquivo Editar Visualizar Assinar Janela Ajuda

Início Ferramentas LMV1404.pdf x

Fazer login

Data: LMV1404.FRW
Library: C:\Program Files\Adobe\Acrobat Reader DC\Library\FABRICO\EMBRAPA\PESQUISA\RESULTADOS\Dados GC_MS\DATA TREATMENT\AMD
Number of Identifications: 95

RT (min)	Compound Name
5.5011	M0000000_A1050002-101-xxx_NA_1031.31 TRUE_VARS_ALK Pyridine, 2-hydroxy (1TMS) (ID# NA) RI = 2014.6 RI-RI (1.1b) = -14.7
5.6744	?? M0000071_A1040002-101-xxx_NA_1037.28 TRUE_VARS_ALK Pyruvic acid (1MEOX) (1TMS) (ID# 55493-92-0) RI = 1037.2 RI-RI (1.1b) = -3.0
5.8442	M000100_A105001-101-xxx_NA_1044.47 TRUE_VARS_ALK Lactic acid (2TMS) (ID# 17596-96-2) RI = 1037.7 RI-RI (1.1b) = -6.8
6.1268	M000686_A1050002-101-xxx_NA_1062.88 TRUE_VARS_ALK Glycolic acid (2TMS) (ID# 33581-77-0) RI = 1055.1 RI-RI (1.1b) = -7.9
6.5869	? M0000026_A100001-101-xxx_NA_1088.46 TRUE_VARS_ALK Alanine (2TMS) (ID# 2899-44-7) RI = 1083.4 RI-RI (1.1b) = -5.1
7.2418	M0000000_A1140002-101-xxx_NA_1131.27 TRUE_VARS_ALK NA114002 classified unknown) (ID# NA) RI = 1121.7 RI-RI (1.1b) = -7.6
7.7024	M0000000_A116014-101-xxx_NA_1158.99 PRED_VARS_ALK Unknownwith-pae-013 (ID# NA) RI = 1152.0 RI-RI (1.1b) = -7.0
RI = 2731.0	RI-RI (1.1b) = 4.7
28.2809	RI=2769.9, 28.2809 min LMV1404 (ID# LMV1404 N1010) RI = 2769.9 RI-RI (1.1b) = 0.0
28.5063	? M0000000_A2790002-101-xxx_NA_2779.48 PRED_VARS_ALK_NA (ID# NA) RI = 2796.7 RI-RI (1.1b) = 17.3
28.9100	?? M0000000_A285001-101-xxx_NA_2841.09 PRED_VARS_ALK_NA285001 (classified unknown) (ID# NA) RI = 2842.6 RI-RI (1.1b) = 1.5
29.2044	RI=2876.0, 29.2044 min LMV1404 (ID# LMV1404 N1012) RI = 2876.0 RI-RI (1.1b) = 0.0
29.6295	? M0000000_A294006-101-xxx_NA_2939.93 PRED_VARS_ALK_NA (ID# NA) RI = 2925.1 RI-RI (1.1b) = -14.8
30.0300	? M0000673_A2990002-101-xxx_NA_2966.29 TRUE_VARS_ALK Galactinol (5TMS) (ID# NA)

EXEMPLOS DE INSERÇÃO A PARTIR DOS RESULTADO DO AMIDS

ARQUIVO LIBRARY_GDM

PROCURAR O COMPOSTO, ESTÁ NA ORDEM CRESCENTE DO RI

COPIAR E COLAR

INSERIR OS NOMES DO ARQUIVO (XCALIBUR) E AMOSTRA NO ARQUIVO SAMPLE ID

E O TEMPO DE RETENÇÃO DO COMPOSTO.

[illegible]

QUANDO OS COMPOSTOS NÃO ESTÃO NO ARQUIVO LIBRARY_GDM

The screenshot shows the AMDIS GC/MS Analysis Report window and an Excel spreadsheet. The report lists several compounds with their retention times (RT) and relative intensities (RI). The Excel spreadsheet shows a table with columns for RT, QTD, RI, Identity, CLASS, m/z(1), m/z(2), m/z(3), and S_name. Blue arrows indicate the process of entering data from the report into the spreadsheet.

AMDIS GC/MS Analysis Report - Mon Mar 29 13:59:36 2021

Page 004

Template: Samples_ID_V2 - Excel

Table 1: Data from AMDIS Report

RT	QTD	RI	Identity	CLASS	m/z(1)	m/z(2)	m/z(3)	S_name
28.5063		2769.9	? M000000_A279002-101-xxx_NA_2779.48_PRED_VAR5_ALK_NA (ID#:NA)					
28.9100		2796.7	?? M000000_A285001-101-xxx_NA_2841.09_PRED_VAR5_ALK_NA285001 (classified unknown) (ID#:NA)					
29.2044		2842.5	RI=2876.0, 29.2044 min LMV1404 (ID#:LMV1404-N1012)					
29.6295		2925.1	? M000000_A294006-101-xxx_NA_2939.93_PRED_VAR5_ALK_NA (ID#:NA)					
30.0300		2971.9	? M000673_A299002-101-xxx_NA_2966.29_TRUE_VAR5_ALK_Galactinol (9TMS) (ID#:NA)					
30.0919		2979.2	M000003_A299001-101-xxx_NA_2977.33_TRUE_VAR5_ALK_Quinic acid, 3-caffeoyl-, cis- (6TMS) (ID#:NA)					
30.1953		2991.3	? M000000_A301005-101-xxx_NA_3003.95_PRED_VAR5_ALK_NA (ID#:NA)					
30.2203		2994.2	? M000005_A301002-101-xxx_NA_2988.16_TRUE_VAR5_ALK_Quinic acid, 5-caffeoyl-, cis- (6TMS) (ID#:NA)					

Table 2: Data from Excel Spreadsheet

RT (CV - caution>3%)	RT (Av)	QTD - cod	RI	Identity	CLASS	m/z(1)	m/z(2)	m/z(3)	S_name
			355.8	NA_2362.58	unknown	331	217	191	24.3661
			271.0	D-α-D-trehalose		361	271	217	27.9044
			2876.0	RI=2876.0, 29.2044 min LMV1404					29.2044
			2994.2	Quinic acid, 5-caffeoyl-, cis-					30.2203

FAZER ISSO PARA TODAS AS AMOSTRAS POR COLUNAS PARA TODOS OS COMPOSTOS IDENTIFICADOS NO RELATORIO DO AMDIS. COLOCAR EM ORDEM CRESCENTE DO INDICE DE RETENÇÃO (RI) QUANDO APARECER UM NOVO COMPOSTO EM UMA NOVA AMOSTRA.

IMPORTANTE.

QUANDO UM COMPOSTO JÁ FOI INSERIDO NO ARQUIVO DO SAMPLE_ID E ESTIVER NA PROXIMA AMOSTRA, SOMENTE COLOCAR O RT DELE NA COLUNA REFERENTE A AMOSTRA.

LEMBRANDO NESSAS CELULAS COLOCAR O NOME DAS AMOSTRAS NOMEADAS POR VOCES.