
Software Analyst MD

Guía para usuarios avanzados



Este documento se proporciona a los clientes que han adquirido un equipo SCiEX, para que lo usen durante el funcionamiento de dicho equipo SCiEX. Este documento está protegido por derechos de propiedad y queda estrictamente prohibida cualquier reproducción total o parcial, a menos que SCiEX lo autorice por escrito.

IVD

El software que se describe en este documento se proporciona bajo un acuerdo de licencia. Está legalmente prohibida la copia, modificación o distribución del software en cualquier medio, a menos que se permita específicamente en el acuerdo de licencia. Además, es posible que el acuerdo de licencia prohíba igualmente desensamblar, realizar operaciones de ingeniería inversa o descompilar el software con cualquier fin. Las garantías son las indicadas en ese documento.

Algunas partes de este documento pueden hacer referencia a otros fabricantes o sus productos, que pueden contener piezas cuyos nombres se han registrado como marcas comerciales o funcionan como marcas comerciales de sus respectivos propietarios. El uso de dichos nombres en este documento pretende únicamente designar los productos de esos fabricantes suministrados por SCiEX para la incorporación en su equipo y no supone ningún derecho o licencia de uso, ni permite a terceros el empleo de dichos nombres de productos o fabricantes como marcas comerciales.

Las garantías de SCiEX están limitadas a aquellas garantías expresas proporcionadas en el momento de la venta o licencia de sus productos, y son representaciones, garantías y obligaciones únicas y exclusivas de SCiEX. SCiEX no ofrece otras garantías de ningún tipo, expresas o implícitas, incluyendo, entre otras, garantías de comercialización o adecuación para un fin específico, ya se deriven de un estatuto, cualquier tipo de legislación, uso comercial o transcurso de negociación; SCiEX rechaza expresamente todas estas garantías y no asume ninguna responsabilidad, general o accidental, por daños indirectos o derivados del uso por parte del comprador o por cualquier circunstancia adversa derivada de este.

Se trata de un sistema para uso diagnóstico *in vitro*. Producto(s) no disponible(s) en todos los países. Para obtener más información, póngase en contacto con el representante de ventas local o consulte sciex.com/diagnostics.

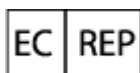
Rx only.

Es posible que los productos no estén disponibles en todos los países. Si desea obtener más información, póngase en contacto con el representante local de ventas o consulte el sitio web sciex.com.

Las marcas comerciales o marcas registradas aquí mencionadas, incluidos sus correspondientes logotipos, son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios, en Estados Unidos y algunos otros países (consulte sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ se usa bajo licencia.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH
Ernst-Leitz-Strasse 17-37
35578 Wetzlar
Germany

CE

UK
CA



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Tabla de contenido

Capítulo 1: Información general	8
Eventos del software Analyst MD	8
Filtrar el registro del sistema para obtener información relevante para el software	
Analyst MD	8
Ventana del software Analyst MD	9
Modos del software Analyst MD	10
Se inicia el software AnalystService	11
Iniciar AnalystService	11
Detenga el AnalystService	12
Carpetas del proyecto API Instrument	12
Program Files	12
Proyectos y subproyectos	13
Subproyectos	13
Organización de proyectos	14
Acceso y seguridad	16
Espacios de trabajo	16
 Capítulo 2: Modo Tune and Calibrate	 19
Ajustes	20
Calibración	20
Ajuste y calibración automáticos	20
(Opcional) Copia de seguridad manual de parámetros del instrumento	21
Restauración de parámetros del instrumento (opcional)	21
Optimización del compuesto	21
Análisis de inyección de flujo	22
Infusión	22
Infusión en T	22
 Capítulo 3: Métodos de adquisición	 23
Dispositivos en métodos de adquisición	23
Añadir o eliminar un dispositivo periférico	23
Definición de las propiedades de la bomba de LC	24
Definir las propiedades del procesador de muestras automático	24
Definición de las propiedades de la bomba de jeringa integrada	25
Definir las propiedades del horno de columna	25
Definición de las propiedades de la válvula de conmutación	26
Configurar los parámetros del detector de diodos en serie (Agilent)	26
Configurar las propiedades del convertidor analógico-digital	26
Tiempo de llenado dinámico	27
Experimentos y periodos	27
Experimentos	27

Periodos	28
Métodos de adquisición dependientes de información	28
Ionización programada	29
Valores de compresibilidad del disolvente	31
Tamaño de la jeringa contra caudal	32
Capítulo 4: Lotes	34
Editor de lotes	34
Importación de archivos de lotes	35
Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor (opcional)	36
Capítulo 5: Análisis de datos cualitativos	37
Cromatogramas	37
Espectros	37
Sustracción de fondo	38
Ejecución de una sustracción de fondo en un cromatograma	38
Desbloquear los intervalos	40
Sustracción de línea base	40
Calculadoras	40
Calculadora de composición elemental	41
Calculadora Hypermass	41
Calculadora de focalización elemental	41
Calculadora de propiedad de masa	41
Calculadora de distribución isotópica	42
Acceso de las calculadoras	42
Picos del centroide	42
Calcular el centroide de un pico	43
Análisis de datos	43
Cromatograma de iones totales	44
Cromatograma de iones extraídos	44
Base Peak Chromatogram	44
Cromatogramas de longitud de onda extraída	44
Detector de diodos en serie	44
Cromatograma de longitud de onda total	44
Superposición de gráficos	45
Alternancia entre gráficos superpuestos	45
Sumar superposiciones	45
Personalizar los gráficos	46
Adición de etiquetas de texto a un gráfico	46
Adición de texto a un gráfico	46
Base de datos de compuestos	47
Gráficos de contorno	47
Ver un gráfico de contorno	49
Selección de una región en un gráfico de contorno	49
Definición de la intensidad y la absorbencia en un gráfico de contorno	49
Cambiar los colores de un gráfico de contorno	50
Algoritmo Dynamic Background Subtraction	50
Interpretación de fragmentos	50

Tabla de contenido

Conectar la herramienta Fragment Interpretation a un espectro	51
Correspondencia de fragmentos con picos	51
Selección de un enlace en una estructura molecular	52
Visualización de isótopos	52
Mostrar la diferencia entre fórmulas en un espectro	52
Visualización de diferencias de fórmula en la lista de fragmentos	53
Visualización de diferencias de fórmula en una estructura molecular	53
Explorador IDA	53
Bases de datos de biblioteca	54
Cambio entre bases de datos de biblioteca existentes	55
Crear una base de datos de bibliotecas locales	56
Conexión a una base de datos de biblioteca de servidor	58
Ver todos los registros de la biblioteca	60
Añadir un registro a la biblioteca	60
Búsqueda de registros de la biblioteca con restricciones	61
Consejos de búsqueda en biblioteca	62
Buscar un espectro similar	62
Visualización de un compuesto desde los resultados de la búsqueda	64
Archivos de datos procesados	64
Guardar un archivo de datos procesados	64
Apertura de un archivo de datos procesados	65
Datos cualitativos	65
Relación señal/ruido	65
Algoritmos de suavizado	65
Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado	66
Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado gaussiano	67
Registros del sistema	68
Guardar el registro del sistema y enviarlo al Soporte	68
Filtrar el registro del sistema para obtener información relevante para el software Analyst MD	68
Capítulo 6: Análisis de datos cuantitativos	70
Opciones de calibración	70
Acerca de las curvas de calibración	70
Selección del mejor tipo de regresión	70
Seleccione el mejor factor de ponderación	71
Algoritmos de integración	72
Algoritmos de integración Analyst Classic e IntelliQuan	72
Herramientas de creación de métodos de cuantificación	74
Asistentes	74
Editor de método de cuantificación	76
El editor de método semiautomático	76
Gráficos de métricas	77
Generación de un gráfico temporal de métricas	78
Generar un gráfico de métrica y guardar los criterios de representación	78
Almacenamiento de criterios de representación predeterminados para futuras tablas de resultados	80
Parámetros de límite de ruido y área	80
Recalcular el límite de ruido y área	81

Integración de picos	81
Revisión de picos	82
Consejos para la revisión de picos	82
Detección de picos	82
Búsqueda del inicio potencial del pico	83
Confirmar el inicio del pico	83
Búsqueda del ápice del pico	85
Búsqueda del final del pico	87
Dividir picos	89
Consultas	90
Consultas sobre el tipo de muestra	90
Consultas predeterminadas y consultas específicas de la tabla	90
Cómo afectan a los resultados las variaciones en precisión	91
Ecuaciones de regresión	91
Opciones de ajuste	92
Factores de ponderación	94
Plantillas de informes	94
Personalización de informes	97
Vista previa, impresión y exportación de informes	97
Tablas de resultados	98
Mostrar una disposición específica para las tablas de resultados	99
Ordenación de los datos en las tablas de resultados	99
Ordenación de una tabla de resultados y almacenamiento de los criterios de ordenación	100
Almacenamiento de criterios de ordenación predeterminados para futuras tablas de resultados	101
Ordenación de una tabla de resultados mediante criterios de ordenación predefinidos	102
Acerca del uso de consultas con las tablas de resultados	102
Comparación de resultados entre lotes	103
Cómo afectan a los resultados los niveles de concentración	103
Disposiciones de la tabla de resultados	103
Campos de la tabla de resultados	107
Consejos para la tabla de resultados	114
Apéndice A: Iconos de la barra de herramientas	115
Apéndice B: Tabla de masas exactas PPG	116
Contacto	122
Formación del cliente	122
Centro de aprendizaje en línea	122
Soporte SCIEX	122
Ciberseguridad	122
Documentación	122

La *Guía para usuarios avanzados* proporciona información acerca de las funcionalidades del software Analyst MD.

Eventos del software Analyst MD

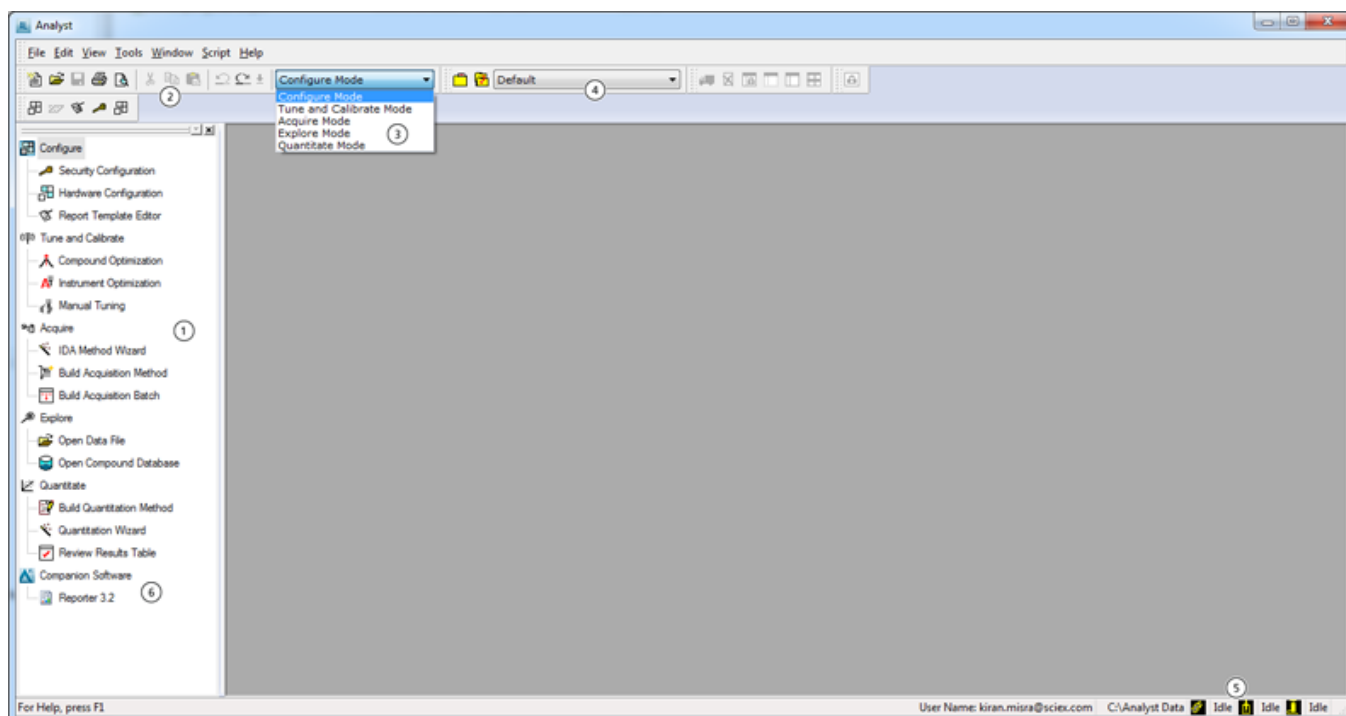
El registro del sistema contiene informes de eventos del sistema que incluyen errores, advertencias y mensajes. Utilice el visor de eventos de Windows para ver la información que pueda ser útil para resolver problemas y realizar un diagnóstico del sistema. Para utilizar la información del registro de sistema con eficacia, filtre la información para mostrar solo los elementos relativos al software.

Filtrar el registro del sistema para obtener información relevante para el software Analyst MD

1. Haga clic en **View > Event Log**.
Se abre el cuadro de diálogo Event Viewer.
2. Haga doble clic en la carpeta **Windows Logs**.
3. Haga clic en **Application**.
4. Haga clic en **Action > Filter Current Log**.
Se abre el cuadro de diálogo Filter Current Log.
5. Seleccione **Analyst** en el campo **Event Sources**.
6. Haga clic en **OK**.
El cuadro de diálogo Event Viewer ahora muestra solamente los eventos filtrados del software Analyst MD.

Ventana del software Analyst MD

Figura 1-1: Ventana del software Analyst MD



Elemento	Descripción
1	<p>Barra de navegación: la barra de navegación permite acceder a los diferentes modos del software. Los usuarios puede personalizar algunos elementos de la barra de navegación para adaptarla a sus preferencias. Por ejemplo, los usuarios pueden cambiar su tamaño, moverla o fijarla en su sitio. Para ocultar la barra de navegación, haga clic en la x de la esquina superior derecha. Para ver la barra de navegación, haga clic en View > Navigation Bar.</p> <p>El nivel superior del árbol de navegación tiene un icono que representa cada modo del software. Haga doble clic en el icono de un modo concreto para expandir o contraer el árbol. Esto muestra u oculta los iconos de las funciones disponibles en el modo seleccionado.</p>
2	Barra de menús: cambia en función del modo. Algunas opciones, como cortar, copiar y pegar, son iguales en todos los modos. Otras opciones son específicas de ciertos modos y no están disponibles en el resto de modos.
3	Lista de modos: haga clic para cambiar de modo. Los diferentes modos disponen de diferentes iconos en la barra de herramientas.

Elemento	Descripción
4	Lista de proyectos: haga clic para cambiar el proyecto en el que se guardan los datos.
5	Estado del instrumento y del dispositivo periférico: la barra de estado contiene información sobre las actividades actuales. Representa el estado del instrumento según su color: verde (preparado), amarillo (inactivo), rojo (error) o blanco (sin estación local de trabajo del instrumento). Un icono indica el estado de un instrumento remoto. Haga doble clic en un icono para abrir la ventana de estado de dispositivos.
6	Software complementario: contiene software complementario instalado que se abre desde el software.

Modos del software Analyst MD

El software se divide en modos, que son áreas funcionales separadas que los usuarios pueden utilizar para llevar a cabo una variedad de actividades relacionadas con una tarea principal. Los usuarios pueden acceder a los modos a través de la barra de navegación o la lista de modos de la barra de herramientas, y pueden cambiar de un modo a otro sin perder el trabajo en curso.

Tabla 1-1: Modos del software Analyst MD

Nombre	Descripción
Configure	(Configurar) Utilice el modo para establecer la configuración de los dispositivos y el sistema. Ajuste diferentes opciones y parámetros del software, incluida la configuración de hardware y la plantilla de informe.
Tune and Calibrate	(Ajuste y calibración) Utilice este modo para establecer las opciones de ajuste de los instrumentos para garantizar unos resultados óptimos. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente: <ul style="list-style-type: none">• Realizar una optimización del instrumento.• Realizar el ajuste manual.• Cambiar la apariencia de las vistas gráficas, seleccionar los tipos de información que se muestran al abrir la información de los archivos y establecer las opciones de enlace y otras opciones de apariencia.• Cambiar las opciones de procesamiento.

Tabla 1-1: Modos del software Analyst MD (continuación)

Nombre	Descripción
Acquire	<p>(Adquirir) Utilice este modo para establecer las opciones que determinan cómo se deben adquirir las muestras. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Crear un método de adquisición IDA con el asistente del método IDA. • Crear un método de adquisición con el editor de métodos de adquisición. • Crear un lote con el editor de lotes. • Ver la cola con el gestor de colas. • Supervisar el estado de la adquisición.
Explore	<p>(Explorar) Utilice este modo para realizar un análisis cualitativo de las muestras. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ver un gráfico. • Ver un cromatograma. • Ver un espectro. • Visualizar datos en tiempo real durante la adquisición de un lote.
Quantitate	<p>(Cuantificar) Utilice este modo para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados. Use la tabla para revisar manualmente todos los picos de cada analito y estándar interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.</p>

Se inicia el software AnalystService

El AnalystService es la vía de comunicación entre el espectrómetro de masas y los dispositivos conectados. El AnalystService se inicia cada vez que se inicia el software Analyst MD. AnalystService se inicia automáticamente cuando el usuario inicia sesión en Windows. Si el servicio no se está ejecutando cuando se inicia el software Analyst MD, AnalystService se iniciará automáticamente.

Iniciar AnalystService

Si el Startup Type para AnalystService se configura como **Manual**, entonces inicie manualmente el AnalystService antes de arrancar el software Analyst MD. No cambie el **Startup Type**.

1. Abra Administrative Tools.
2. Haga doble clic en **Services** y luego en **AnalystService**.
3. Haga clic en **Start**.

Detenga el AnalystService

Detenga el AnalystService si hay problemas de comunicación con el instrumento o si hay problemas de comunicación entre el instrumento y los dispositivos periféricos.

1. Abra Administrative Tools.
2. Haga doble clic en **Services** y luego en **AnalystService**.
3. Haga clic en **Stop**.

Carpetas del proyecto API Instrument

Estas son algunas de las carpetas que se encuentran en el proyecto API Instrument:

- **Bundler:** contiene un programa que recoge todos los aspectos de un archivo de datos (archivo wiff) y los combina automáticamente cuando se completa la muestra.
- **Configuration:** contiene todos los perfiles de hardware (archivos hwpf).
- **Instrument Data:** contiene un archivo denominado `InstrumentData.ins`. El archivo almacena toda la información esencial de la calibración y otros datos.
- **Method Tables:** contiene todos los parámetros del instrumento que definen las funciones de análisis mejorado. No modifique los archivos de esta carpeta. Modificar el contenido de esta carpeta afectará al funcionamiento de los modos de análisis mejorado.
- **Parameter Settings:** contiene todos los parámetros y asociaciones del instrumento. Los parámetros del instrumento se guardan como archivos `ParamSettingsdef.psf`.
- **Preferences:** contiene el archivo `Tunedata.tun`. Toda la configuración, incluidos parámetros, ajustes, instrumento, procesamiento, aspectos y cola, se guardan en esta carpeta como `Tunedata.tun`.
- **Processing Scripts:** contiene los scripts para el procesamiento de datos en el modo de exploración. Los scripts se encuentran en el menú **Script**.
- **Queue Data:** contiene información sobre la cola.
- **Tuning CacheStart:** contiene todos los datos creados en el ajuste manual al hacer clic en lugar de en **Acquire**. Los archivos se guardan con una marca de hora y fecha para sus nombres. La carpeta Tuning Cache contiene un número limitado de archivos y sobrescribirá los archivos según sea necesario. Guarde los archivos con un nombre nuevo y mueva los archivos de inmediato si necesitan guardarse.

Program Files

Las siguientes carpetas están contenidas en la carpeta `Program Files\Analyst` en los sistemas operativos Windows 7, 32 bits o en `Program Files (x86)\Analyst` en los sistemas operativos Windows 7, 64 bits o Windows 10, 64 bits.

- **bin:** contiene los archivos de programa del software Analyst MD. El contenido de esta carpeta no debe modificarse, ya que esto afectaría al funcionamiento del software.

- **binEx2:** contiene los componentes necesarios para controlar los dispositivos ExionLC 2.0.
- **binEx:** contiene los componentes necesarios para controlar dispositivos ExionLC, Jasper y Shimadzu LC20/30 controlados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC-20/30 y dispositivos Shimadzu LC40.
- **Firmware:** contiene los archivos de la tabla de configuración del firmware del sistema del instrumento y los archivos del firmware del instrumento. Para obtener más información, consulte la *guía de instalación del software* incluida con el software.
- **Ayuda:** contiene el archivo de ayuda, guías, tutoriales, *notas de publicación* y la *guía de instalación del software*.
- **Scripts:** contiene los scripts que puede instalar el usuario si es necesario. Estos scripts no se instalan automáticamente cuando se instala el software Analyst MD. Para obtener más información, consulte el documento *Guía de usuario de scripts*.
- **Simulation:** contiene los archivos de datos del instrumento que son necesarios para ejecutar el software en el modo de simulación.

Proyectos y subproyectos

Decida dónde almacenar los archivos relativos a un experimento antes de iniciar el experimento. Utilice proyectos y subproyectos para cada experimento con el fin de gestionar mejor los datos y comparar los resultados. Por ejemplo, se pueden utilizar subproyectos para almacenar los resultados de fechas específicas.

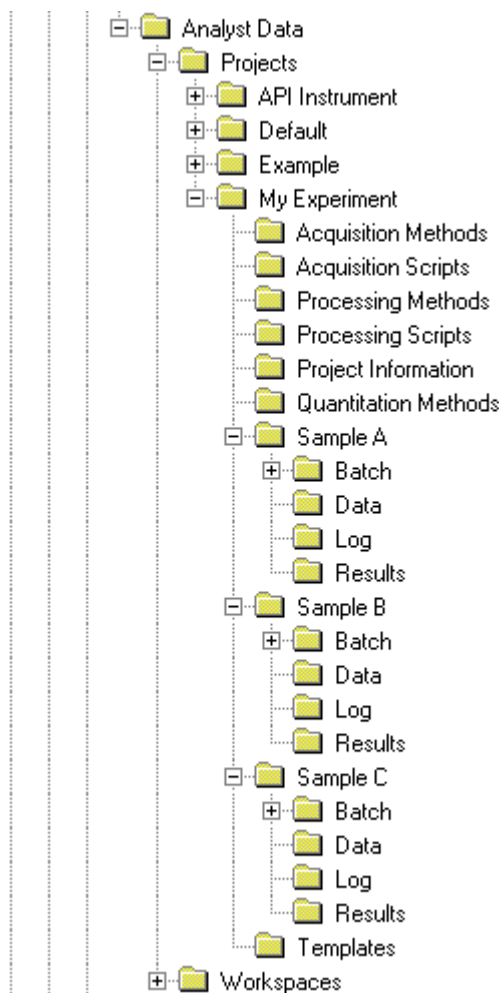
Nota: Para utilizar una estructura de subproyectos dentro de un proyecto, cree al menos un subproyecto cuando cree por primera vez el proyecto. Los usuarios no pueden crear un subproyecto en un proyecto existente que no tenga ya una estructura de subproyectos.

Subproyectos

Un subproyecto contiene un subconjunto de las carpetas del proyecto. Todos los subproyectos deben contener las mismas carpetas. Los subproyectos son útiles para organizar los datos.

Por ejemplo, si está procesando muestras de varios compuestos de diferentes laboratorios con el mismo método de adquisición, cree subproyectos para almacenar en cada uno de ellos los resultados de cada laboratorio, pero deje la carpeta de método de adquisición en el proyecto. De este modo, el método de adquisición estará disponible para usarlo en cada subproyecto o laboratorio. Como alternativa, si las muestras se están analizando para un periodo de varias semanas, los resultados de cada día se pueden almacenar en un subproyecto aparte. Consulte la figura siguiente.

Figura 1-2: Ejemplo de una estructura de carpetas con proyectos y subproyectos



Organización de proyectos

Un proyecto es una estructura de carpetas para organizar y almacenar información de muestras, datos, información de cuantificación, etc. Dentro de cada proyecto, hay carpetas que contienen diferentes tipos de archivos. Por ejemplo, la carpeta Data contiene los archivos de datos de adquisición. Consulte la siguiente tabla para ver una descripción del contenido de las diferentes carpetas.

El software puede acceder a un proyecto solo si está almacenado en una carpeta raíz. Los usuarios no pueden crear proyectos en una carpeta que no se haya definido como carpeta raíz.

La carpeta raíz predefinida es Analyst Data, en la unidad en la que se ha instalado el software. Para almacenar proyectos en otras ubicaciones, cree nuevas carpetas raíz. Para obtener más información acerca de las carpetas raíz, consulte el documento *Ayuda*.

Tabla 1-2: Carpetas del proyecto

Carpeta	Contenido
\Acquisition Methods	Contiene todos los métodos de adquisición disponibles. Los archivos de métodos de adquisición tienen la extensión dam.
\Acquisition Scripts	<p>Los scripts de adquisición no están disponibles con el software Analyst MD. Esta carpeta está vacía.</p> <p>El uso de la función de creación de scripts del software Analyst MD, que permite la creación de scripts personalizados (secuencias de funcionamiento de Analyst personalizadas), no se debe utilizar como parte de un dispositivo de diagnóstico <i>in vitro</i>. Las comprobaciones de software vinculadas al software Analyst MD que no se ejecutan en los scripts personalizados y puede provocar que los resultados se vinculen de manera incorrecta a un identificador de muestra.</p>
\Batch	Contiene todos los archivos de lotes de adquisición disponibles. Los archivos de lotes de adquisición tienen la extensión dab. Esta carpeta también contiene una subcarpeta, denominada Templates, que contiene las plantillas de los lotes de adquisición. Los archivos de plantillas de lotes tienen la extensión dat.
\Data	Contiene los archivos de datos de adquisición, que tienen la extensión wiff.
\Log	Contiene los resultados de cuantificación y optimización de compuestos.
\Processing Methods	Contiene todos los métodos de procesamiento de datos cualitativos utilizados.
\Processing Scripts	Contiene los scripts de procesamiento de datos. Los scripts de procesamiento que se almacenan en el proyecto API Instrument se muestran en el menú Scripts .
\Project Information	Contiene toda la información y configuración del proyecto. Esta carpeta no se puede almacenar en un subproyecto.
\Quantitation Methods	Contiene todos los métodos de cuantificación utilizados, que tienen la extensión qmf.
\Results	Contiene todos los archivos de la tabla de resultados de cuantificación, que tienen la extensión rdb.
\Templates	Contiene los archivos de plantillas de informe, que tienen la extensión rpt.

Acceso y seguridad

El software Analyst MD funciona con los componentes de seguridad, aplicación y auditoría de eventos del sistema de las herramientas administrativas de Windows.

Además, el software tiene varias funciones para configurar y gestionar la seguridad. El administrador del software puede hacer lo siguiente:

- Escoger un modo de seguridad se adapte mejor a las necesidades del entorno operativo.
- Añadir y borrar usuarios y roles.
- Establecer derechos de acceso para los usuarios y funciones, según sea necesario.
- Controlar el acceso a espectrómetros de masas remotos.
- Controlar el acceso a los archivos de proyectos.

Para obtener más información sobre la seguridad del software, consulte la *Guía del director del laboratorio*.

Nota: Los cambios realizados en la configuración de seguridad del software surtirán efecto tras reiniciar el software.

Espacios de trabajo


Un espacio de trabajo es una disposición específica de ventanas y paneles, incluyendo cualquier archivo o archivos asociados. Por ejemplo, mientras trabajan en un conjunto de datos específico, los usuarios pueden abrir y cambiar el tamaño de varias ventanas para ayudarlos en su análisis. Esta disposición o espacio de trabajo se puede guardar, de modo que la siguiente vez que los usuarios examinen los datos, la disposición de las ventanas sea la misma.

Los usuarios pueden personalizar un espacio de trabajo eligiendo qué ventanas y paneles quieren que contenga cada espacio de trabajo. Los usuarios pueden cambiar el tamaño y la posición de las ventanas y los paneles, bloquear paneles para que permanezcan unidos y ocultar o mostrar determinados paneles y ventanas. De este modo, los usuarios pueden personalizar un espacio de trabajo para adaptarse a las tareas en cuestión.

En los modos Cuantificar y Explorar, los usuarios pueden disponer de varios espacios de trabajo por sesión. El usuario puede guardar un espacio de trabajo, que también incluye los datos asociados. Al estar en uno de estos dos modos, se puede abrir un espacio de trabajo específico sin tener que salir de ese modo. Para reutilizar una determinada disposición de ventanas y paneles para otros conjuntos de datos, el usuario puede guardar un espacio de trabajo como plantilla. En los modos de Afinar y Calibrar o Adquirir, el software guarda el espacio de trabajo automáticamente.

Para realizar esta acción	Haga esto
Crear un espacio de trabajo	<ol style="list-style-type: none"> 1. En la barra de navegación, haga clic en el modo en el que se creará el espacio de trabajo. 2. Abra las ventanas y los paneles que se incluirán en el espacio de trabajo y, a continuación, organícelos en la pantalla, bloqueando las ventanas para que queden unidas y cambiando el tamaño de las ventanas y los paneles según sea necesario. 3. Haga clic en File > Save Workspace. 4. En el campo File name, escriba un nombre de archivo para el espacio de trabajo. <hr/> <p>Nota: El nombre del espacio de trabajo y la ruta no pueden superar los 255 caracteres. El nombre del espacio de trabajo va seguido de un punto y una extensión wws para indicar que se trata de un archivo de estación de trabajo.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 5. Haga clic en Save. <p>La información del espacio de trabajo se guarda en un archivo con la extensión wws en el directorio especificado.</p>
Abrir un espacio de trabajo	<p>En los modos Quantitate y Explore, se pueden abrir diferentes espacios de trabajo sin salir del modo actual.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Haga clic en File > Open Workspace. 2. Seleccione el archivo de espacio de trabajo adecuado de la lista y haga clic en OK.
Guarde un espacio de trabajo	<ol style="list-style-type: none"> 1. En el modo Quantitate o Explore, asegúrese de que el espacio de trabajo esté activo. 2. Haga clic en File > Save Workspace As. <hr/> <p>Sugerencia: Haga clic en Save Workspace para guardar la información del espacio de trabajo con el nombre y la ubicación actuales del archivo.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 3. Escriba un nombre para el archivo del espacio de trabajo y haga clic en Save. <p>El software guarda la información de las ventanas y paneles automáticamente como parte del espacio de trabajo asociado al modo actual. En los modos Configure, Tune and Calibrate o Acquire, el software guarda automáticamente el espacio de trabajo cuando el usuario cierra el modo actual.</p>

Información general

Para realizar esta acción	Haga esto
Bloquear el software	1. En la barra de herramientas, haga clic en Lock Application  .

El ajuste y la calibración del espectrómetro de masas optimizan el rendimiento de la resolución y la intensidad.

Durante el ajuste se pueden realizar las siguientes tareas:

- Ajuste los valores de desviación de la resolución para ajustar la intensidad y la resolución de las masas de calibración (solo para el modo cuádrupolo).
- Seleccione las masas que desee calibrar. Si es necesario, puede agregar y eliminar masas de la lista de calibración.
- Cree uno o varios conjuntos de estándares de calibración únicos. Un conjunto de estándares de calibración debe constar de al menos dos compuestos para los extremos alto y bajo del rango de masas de interés.

Un instrumento ajustado y calibrado puede detectar la resolución de pico especificada y la asignación de masa de la muestra. Esto se consigue utilizando un estándar de calibración conocido, como el PPG (glicol de polipropileno). Se utiliza un estándar de calibración para calibrar la escala de masas y detectar los iones objetivo lo más cerca posible de su relación exacta masa-carga, dentro de un desplazamiento de masa aceptable. Además de identificar el pico exacto, los usuarios pueden ajustar la resolución para obtener la anchura y la forma óptimas del pico.

Un espectrómetro de masas correctamente ajustado y calibrado arroja el mejor resultado para cualquier muestra o compuesto analizado en el espectrómetro de masas. El ajuste y la calibración se realizan conjuntamente, independientemente de la optimización. El ajuste y la calibración se centran en la resolución y la calibración de la masa. La optimización se concentra en la sensibilidad.

Los cambios en la configuración del espectrómetro de masas durante el ajuste y la calibración se guardan en archivos de datos en la carpeta API Instrument. Es necesario utilizar los parámetros predefinidos de la carpeta de métodos API Instrument, ya que son parámetros optimizados por el representante del servicio técnico (FSE) de SCIEX.

Tras el ajuste y la calibración, el rendimiento del sistema se maximiza y los parámetros especificados se convierten en los parámetros predeterminados para todos los experimentos. Los usuarios pueden hacer experimentos con los parámetros optimizados dependientes de la fuente y del compuesto para maximizar la respuesta para cualquier analito.

Sugerencia: Limpie la zona Q0 de forma regular para reducir al mínimo el impacto de la carga (pérdida significativa de sensibilidad de los iones de interés en un corto periodo de tiempo) sobre los cuádrupolos. Consulte el documento *Guía del personal de mantenimiento cualificado*.

Los usuarios pueden ajustar y calibrar el instrumento de manera automática o manual.

Automatic tuning: el software realiza la optimización de la resolución y la calibración de masas mediante el asistente de optimización del instrumento. En los instrumentos de trampa lineal de iones (LIT), también se realizan optimizaciones de MS³.

Manual tuning: los usuarios pueden realizar muchas de las optimizaciones de resolución y calibraciones del instrumento de manera manual.

Ajustes

El ajuste del espectrómetro de masas es el proceso de optimización de la resolución y los parámetros del instrumento destinado a obtener la mejor sensibilidad y rendimiento posibles del espectrómetro de masas. Ajustar y calibrar el espectrómetro de masas periódicamente o si el rendimiento del sistema ha disminuido. Optimizar el espectrómetro de masas para maximizar la respuesta de una nueva muestra o compuesto. La optimización de la resolución incluye el ajuste de la anchura y la forma de pico.

Calibración

La calibración de masas es el proceso mediante el que se asignan los valores correctos de la relación masa-carga (m/z) a los picos de masa. Al llevar a cabo una calibración de masas con un estándar de calibración, como el glicol de polipropileno (PPG), se pueden comparar los resultados con una calibración anterior para determinar cuánto se aproximan a los valores teóricos los valores m/z . La calibración anterior se puede actualizar o, más comúnmente, sustituirse por la nueva calibración.

Seleccione varias masas cuando calibre análisis Q1, Q3 y todos los análisis LIT para cada polaridad. Los resultados se almacenan en una tabla de calibración. Cuando se realiza una calibración de masas, la tabla de calibración se actualiza con los nuevos valores del convertidor digital-analógico (DAC) de la nueva calibración o de las masas ya existentes en la tabla de calibración. Todos los datos de las masas no calibradas en la calibración actual se conservan. Si se sustituye la calibración de masas, se sustituyen todos los valores de calibración anteriores para todas las masas. Realice una calibración de masas utilizando un espectro recién adquirido o utilice un espectro de un archivo de datos almacenado.

Ajuste y calibración automáticos

Instrument Optimization es un software de ajuste de instrumentos automático que ajusta los modos de cuadrupolo y LIT y realiza la calibración de masas. En el modo de cuadrupolo, ajusta las desviaciones de resolución. En el modo de LIT, optimiza AF3 y EXB. Para MS³, ajusta los coeficientes de excitación y aislamiento. Seleccione una de las opciones de rendimiento del instrumento siguientes:

- **Verify instrument performance:** prueba el rendimiento del instrumento pero no cambia su configuración. Se genera un informe al final de la prueba. Utilice esta opción semanalmente para comprobar la medida del rendimiento del instrumento.
- **Adjust mass calibration only:** comprueba y ajusta automáticamente la calibración de masas. Si la calibración de masas ha cambiado, el software la corrige. Utilice esta opción semanalmente para instrumentos LIT o mensualmente para comprobar y ajustar la calibración de masas, si es necesario.

- **Adjust instrument settings:** comprueba y ajusta la configuración del instrumento y la calibración de masas. La configuración del instrumento se actualiza de modo que la configuración actual adopta la configuración óptima. Utilice esta opción si el rendimiento del instrumento es bajo o si la forma del pico es incorrecta. La configuración del instrumento solo deben ajustarla usuarios calificados.

Nota: Los métodos LIT antiguos deben actualizarse con la nueva configuración. Cambie la velocidad de LIT en la pestaña Advanced MS y, a continuación, guarde el método.

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** restablece los valores del instrumento a los valores predeterminados de fábrica. Seleccione esta opción si se ha reemplazado un componente principal del instrumento o tras la primera instalación. *Esta función solo deben utilizarla representantes del servicio técnico.*

(Opcional) Copia de seguridad manual de parámetros del instrumento

Haga una copia de seguridad de los parámetros del instrumento actuales en caso de que deba restaurarlos más tarde. La ubicación predeterminada de los parámetros del instrumento de los que se hizo copia de seguridad manual es <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.
2. Haga clic en **File > Backup Instrument Settings**.
3. Escriba un nombre de archivo.
4. Haga clic en **Save**.

Restauración de parámetros del instrumento (opcional)

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.
2. Haga clic en **File > Restore Instrument Settings File**.
3. Desplácese hasta la configuración del instrumento que vaya a restaurar.
4. Haga clic en **Open**.

Optimización del compuesto

El asistente del software de optimización de compuestos optimiza automáticamente un analito. Las muestras se pueden introducir utilizando infusión o FIA (análisis de inyección de flujo). El software comprueba primero la presencia de los compuestos. Los voltajes de los diferentes parámetros de la ruta iónica se incrementan o reducen de forma gradual para determinar la intensidad de señal máxima (análisis Q1) de cada ión. Durante el proceso de

optimización, se genera y muestra un archivo de texto. Este archivo registra los diferentes experimentos que se han realizado y los valores óptimos para cada parámetro de la óptica iónica. También se genera una carpeta de archivos en la que se almacenan todos los experimentos realizados y a la que puede acceder abriendo la carpeta de archivos de datos en el modo Explore. Para cada experimento realizado, también se genera un método de adquisición, que se guarda en la carpeta de métodos de adquisición.

Análisis de inyección de flujo

El análisis de inyección de flujo (FIA) consiste en la inyección de una pequeña cantidad de una muestra en la corriente de LC mediante un procesador de muestras automático. Durante el proceso de optimización de FIA se llevan a cabo múltiples inyecciones de muestras para diferentes tipos de parámetros, dependientes de la fuente o del compuesto, o de ambos, que se modifican entre inyecciones. FIA permite optimizar el potencial de desagrupación, la energía de colisión y el potencial de salida de la celda de colisión al realizar experimentos en bucle de forma sucesiva, es decir, un parámetro dependiente del compuesto seguido del siguiente parámetro dependiente del compuesto. Optimiza parámetros dependientes de la fuente realizando una inyección para cada parámetro.

Utilice la optimización de FIA para optimizar los parámetros dependientes tanto del compuesto como de la fuente usando LC con caudales más elevados.

Infusión

La infusión consiste en introducir un flujo continuo de muestra con caudales bajos en la fuente de iones mediante el uso de una bomba de jeringa. Durante el proceso de optimización de la infusión, el software puede seleccionar los iones precursores y producto, así como optimizar para ambos el potencial de desagrupación, la energía de colisión y el potencial de salida de la celda de colisión. Los voltajes de estos parámetros de la ruta iónica se incrementan o reducen de forma gradual para determinar la intensidad de señal máxima de los iones precursores y producto.

Utilice la optimización de la infusión para optimizar los parámetros dependientes de los compuestos únicamente con caudales inferiores a los utilizados en los análisis LC/MS.

Infusión en T

La infusión en T (o infusión dividida) es el flujo continuo de la muestra a baja velocidad hacia la fuente de iones a través de una unión a tierra de tres vías en la fuente de iones. La unión de tres vías a tierra se conecta a una bomba de jeringa con un tubo PEEK rojo y una bomba de LC.

Al crear un archivo de método de adquisición a partir de un archivo existente, el usuario puede utilizar algunos o todos los métodos de dispositivo en el método de adquisición. Utilice el editor del método de adquisición para personalizar el método de adquisición mediante la adición o eliminación de métodos de dispositivos. Si el icono del dispositivo necesario no figura en el panel del navegador del método de adquisición, los usuarios solo podrán agregar ese dispositivo si está incluido en el perfil de hardware activo.

Recomendamos que tan solo creen o modifiquen métodos de adquisición y cuantificación aquellos usuarios que tengan experiencia en el desarrollo de métodos. Para obtener más información sobre las funciones y la seguridad, consulte la sección *Acerca de las personas y las funciones* en el documento *Guía del director de laboratorio*.

Dispositivos en métodos de adquisición

Cree un método de adquisición para un dispositivo periférico seleccionando los parámetros de funcionamiento para ese dispositivo. Se pueden crear métodos de adquisición para cualquiera de los dispositivos siguientes, si están configurados en el perfil de hardware activo:

- Bombas
- Procesadores de muestras automáticos
- Bombas de jeringa
- Hornos de columna
- Válvulas de conmutación
- Detector de diodos en serie
- Convertidores analógico-digital
- Sistemas integrados

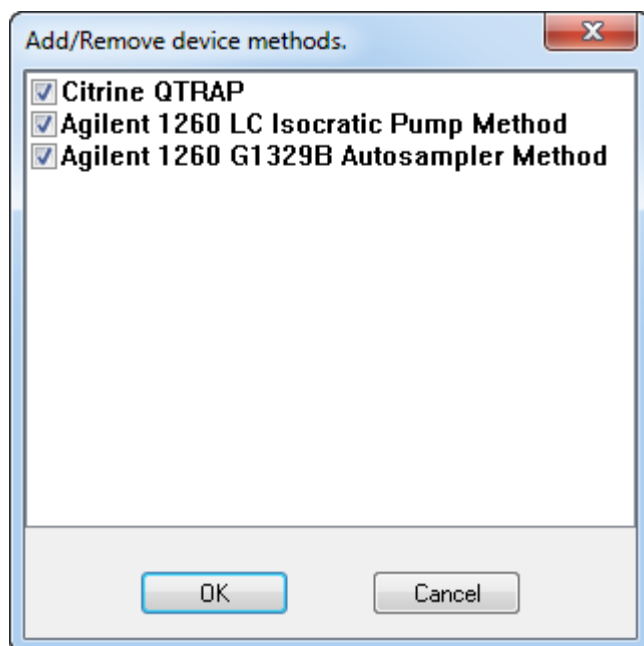
Para obtener información acerca de la configuración de propiedades para los dispositivos, consulte la *Guía de configuración de dispositivos periféricos*.

Nota: Los parámetros disponibles para dispositivos de LC variarán en función del fabricante.

Añadir o eliminar un dispositivo periférico

1. Con un archivo de método abierto en el editor de método de adquisición, en el panel Acquisition method, haga clic con el botón derecho en **Acquisition Method** y luego haga clic en **Add/Remove Device Method**. Se abre el cuadro de diálogo Add/Remove Device Method, mostrando los dispositivos configurados en el perfil de hardware activo.

Figura 3-1: Cuadro de diálogo Add/Remove device methods



2. Active o desactive la casilla de verificación situada junto al método de dispositivo correspondiente para agregar o quitar el método de dispositivo.
3. Haga clic en **OK**.

Definición de las propiedades de la bomba de LC

1. Con un archivo de método de adquisición abierto en Acquisition Method Editor, realice una de las acciones siguientes en el panel Acquisition Method:
 - Para la bomba Agilent, haga clic en el icono **Pump**.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC, haga clic en **Shimadzu LC System**.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC-20/30, dispositivos Shimadzu LC 40, dispositivos ExionLC, dispositivos ExionLC 2.0 o dispositivos Jasper LC, haga clic en **LC System**.
2. Seleccione la pestaña de la bomba de LC en el panel derecho, si no está ya seleccionada, y edite las propiedades o la configuración según sea necesario.
3. Guarde el archivo.

Definir las propiedades del procesador de muestras automático

1. Asegúrese de que, en la pestaña Acquisition Properties, el campo **Synchronization Mode** se configura como **LC Sync**. El dispositivo, la inyección de muestras y la adquisición del instrumento se iniciarán simultáneamente.

2. Con un archivo de método abierto en el editor de método de adquisición, en el panel Acquisition method, realice una de las acciones siguientes:
 - Para el procesador de muestras automático Agilent, haga clic en el icono Agilent Autosampler.
 - Para el procesador de muestras automático CTC Pal, haga clic en el icono CTC PAL Autosampler.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC, haga clic en **Shimadzu LC System**.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC-20/30, dispositivos Shimadzu LC 40, dispositivos ExionLC, dispositivos ExionLC 2.0 o dispositivos Jasper LC, haga clic en **LC System**.
3. Abra la pestaña del Autosampler en el panel derecho y luego edite las propiedades o la configuración según sea necesario.
4. Guarde el archivo.

Definición de las propiedades de la bomba de jeringa integrada

Este procedimiento se utiliza con sistemas que contienen bombas de jeringa integradas.

1. Con un archivo de método de adquisición abierto en Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition Method Browser, haga clic en el icono Syringe Pump. Aparece la pestaña Syringe Pump Method Properties en el panel Acquisition Method Editor.
2. Edite los campos como sea necesario.
3. Guarde el archivo.

Definir las propiedades del horno de columna

1. Con un archivo de método de adquisición abierto en Acquisition Method Editor, realice una de las acciones siguientes en el panel Acquisition Method:
 - Para el horno de columna Agilent, haga clic en el icono de **Agilent Column Compartment**.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC, haga clic en **Shimadzu LC System**.
 - Para los dispositivos Shimadzu LC 20/30 activados mediante el controlador del sistema integrado Shimadzu LC-20/30, dispositivos Shimadzu LC 40, dispositivos ExionLC, dispositivos ExionLC 2.0 o dispositivos Jasper LC, haga clic en **LC System**.
2. Seleccione la pestaña del horno de columna en el panel derecho, si no está ya seleccionada, y edite las propiedades o la configuración según sea necesario.
3. Guarde el archivo.

Definición de las propiedades de la válvula de conmutación

La válvula de conmutación se puede utilizar como válvula desviadora o de inyección. Seleccione el modo de sincronización **Manual Sync with Valve** si se está utilizando la válvula como inyector. Seleccione cualquier otro modo si se está utilizando la válvula como desviador.

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor en el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Valve**.
Se abrirá la pestaña Valve Properties en el panel Acquisition Method Editor.
2. Si es necesario, cambie los nombres predefinidos de los nombres de posición.
En ocasiones, la válvula de conmutación se utiliza para desviar el flujo de disolvente al sistema de recogida de residuos o a otra columna. Los nombres de posición predefinidos son A y B.
 - En la lista **Change Position Names**, seleccione una posición.
 - En la lista **Change Position Names**, cambie el nombre de las posiciones predefinidas en función de la forma en que se haya instalado la válvula. Si la válvula se utiliza como inyector, entonces cambie el nombre de A y B a Inject and Divert o Column and Waste. Si la válvula se utiliza como desviador, entonces cambie los nombres a A y B por Divert and Inject o Waste and Column.
3. En la columna **Total Time (min)**, haga clic en una celda y, a continuación, escriba el tiempo total que la válvula permanecerá en esta posición.
4. En la columna **Position**, haga clic en una celda y, a continuación, en la lista **Position**, seleccione la posición de la válvula.
5. Repita los pasos 3 y 4 para cada cambio de la válvula requerido durante la adquisición.
6. Guarde el archivo.

Configurar los parámetros del detector de diodos en serie (Agilent)

1. Con un archivo de métodos de adquisición abierto en Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition Method, haga clic en el icono Agilent Diode Array Detector (Detector de diodos en serie Agilent).
Se abre la pestaña Agilent DAD Method Editor en el panel Acquisition Method Editor.
2. Edite las propiedades como sea necesario.
3. Guarde el archivo.

Configurar las propiedades del convertidor analógico-digital

1. Con un archivo de método abierto en Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition Method, haga clic en el icono Analog to Digital Converter (ADC).
Se abrirá la pestaña Analog/Digital Converter Properties en el panel Acquisition Method Editor.

2. En la sección Sample, en el campo **Rate (pts/sec)**, indique la velocidad.

Nota: El intervalo y la velocidad son proporcionales entre sí. Cuando se modifica la velocidad, el software calcula automáticamente el intervalo de nuevo.

3. Realice lo siguiente para establecer los detalles del canal:
 - a. En el campo **Channels**, haga clic en el nombre del canal y, a continuación, active la casilla de verificación situada junto al nombre para incluirlo en el método.
 - b. En el campo **Interpreted Value @ Full Scale**, indique el valor adecuado.
 - c. En el campo **Interpreted Unit**, indique la unidad adecuada.

El número de canales disponibles se especifica cuando se configura el ADC en el perfil de hardware.

4. Guarde el archivo.

Tiempo de llenado dinámico

El tiempo de llenado dinámico (DFT) es una característica diseñada específicamente para optimizar los datos obtenidos en cada espectro para las funciones del análisis de trampa lineal de iones. DFT ajustará de forma automática el tiempo utilizado para llenar la trampa de iones en función del flujo de iones procedente de la fuente. En el caso de iones más intensos, el tiempo de llenado se reducirá automáticamente con el fin de garantizar que la trampa no se llene en exceso de iones.

En el caso de iones menos intensos, el tiempo de llenado se incrementará automáticamente con el fin de garantizar buenas estadísticas iónicas obtenidas en el espectro. DFT puede utilizarse en los siguientes tipos de análisis:

- MS mejorada (EMS)
- Resolución mejorada (ER)
- Ion producto mejorado (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

Ajuste la configuración de DFT seleccionando **Tools > Settings > Method Options** en el software.

Experimentos y periodos

El método de adquisición del espectrómetro de masas consta de experimentos y periodos. En el panel Acquisition Method Browser, cree una secuencia de experimentos y periodos de adquisición para el espectrómetro de masas. También puede abrir un método creado anteriormente en el editor del método de ajuste.

Experimentos

Un experimento incluye la configuración del espectrómetro de masas y el tipo de análisis durante un análisis MS. Un conjunto de análisis MS llevados a cabo durante un periodo de

Métodos de adquisición

tiempo específico se denomina un periodo. Un método de adquisición en el que las acciones y parámetros de MS son los mismos durante su duración completa se denomina un método de periodo único y experimento único.

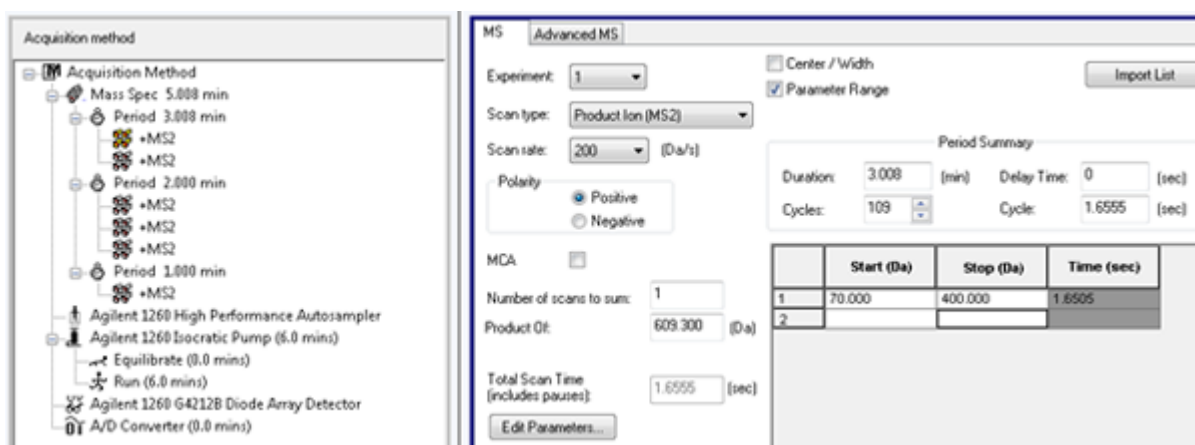
En los experimentos en bucle, la configuración de MS se modifica de análisis en análisis. Por ejemplo, si la muestra contiene dos compuestos, A y B, los usuarios posiblemente quieran llevar a cabo en bucle un experimento MS/MS del compuesto A y un experimento MS/MS del compuesto B, para obtener información sobre los dos compuestos en el mismo ciclo. El método del espectrómetro de masas alternará entre los dos tipos de análisis. Otros ejemplos de experimentos en bucle incluyen alternar entre el modo positivo y negativo en un ciclo y los métodos de adquisición dependiente de información (IDA).

Periodos

Un periodo puede constar de uno o más experimentos en bucle. En un método de adquisición de periodo múltiple, los experimentos se llevan a cabo durante un periodo de tiempo específico, y después el software cambia a otro conjunto de experimentos. Los periodos son útiles cuando se conoce el tiempo de elución de los compuestos de un ciclo de LC. El espectrómetro de masas puede llevar a cabo diferentes experimentos dependiendo de cuándo los compuestos se eluyan, para obtener la mayor información posible en el mismo ciclo.

La siguiente figura muestra un método de tres periodos.

Figura 3-2: Ejemplo de un experimento de periodos múltiples



Métodos de adquisición dependientes de información

Un método IDA ejecuta automáticamente experimentos en función de los resultados obtenidos de los ciclos anteriores. Utilice criterios IDA para optimizar la configuración de la adquisición de datos mientras obtiene estos, para reducir el tiempo de adquisición de la muestra en una única inyección. Con IDA, los usuarios pueden reducir la cantidad de muestra requerida y ahorrar tiempo de trabajo muy valioso.

Cree un método IDA con hasta dos análisis de estudio y análisis dependientes para un máximo de ocho picos más intensos en un único período. El análisis de estudio se utiliza en el IDA para llevar a cabo experimentos adicionales. Los siguientes tipos de análisis se pueden utilizar como análisis de estudio:

- Ion producto mejorado (EPI) (análisis de estudio de segundo nivel)
- MS mejorada (EMS)
- Algoritmo de monitorización de reacciones múltiples (MRM) o algoritmo *Scheduled* MRM
- Pérdida neutra (NL)
- Ion precursor (Prec)
- Espectrometría de masas Q3 (Q3 MS)

Los siguientes tipos de análisis se pueden utilizar como análisis dependientes:

- EPI
- MS/MS

Durante la adquisición de un método IDA, las acciones del espectrómetro de masas varían en cada análisis en función de los datos adquiridos en el ciclo anterior. El software analiza los datos a medida que estos se adquieren y, a continuación, determina las masas sobre las que se van a realizar los análisis dependientes. Los usuarios pueden establecer los criterios que activarán un experimento IDA, así como los parámetros del método que se deben utilizar.

La adquisición del método IDA mejora los resultados al realizar análisis dependientes en función de los siguientes criterios definidos por el usuario:

- Intensidad y estado de la carga de los iones
- Listas de inclusión y exclusión
- Patrón de isótopos
- Exclusión dinámica
- Velocidad de cambio de la intensidad de los iones (consulte la sección [Algoritmo Dynamic Background Subtraction](#).)

Ionización programada

La función *Scheduled Ionization* se puede utilizar para reducir el tiempo de inactividad del espectrómetro de masas reduciendo el riesgo de contaminación. Está disponible en Acquisition Method Editor y puede utilizarse para la adquisición por lotes utilizando un método de adquisición de un solo periodo. Consulte la figura siguiente.

Figura 3-3: Programe la función de Ionización en Acquisition Method Editor

The screenshot shows the 'Advanced MS' tab in the Acquisition Method Editor. The 'Scan type' is set to 'MRM (MRM)'. The 'Period Summary' section shows 'Duration: 0.000 (min)', 'Cycles: 600', 'Delay Time: 0 (sec)', and 'Cycle: 0.0000 (sec)'. The 'Scheduled Ionization' checkbox is checked and highlighted with a red box. Below it, 'Start Time' and 'Stop Time' are both set to 0 (min). The 'Total Scan Time (includes pauses)' is 0.0000 (sec). The 'DMS Off' checkbox is checked. The 'Ramp COV' section shows 'Start: -30.000', 'Stop: 30.000', and 'Step: 0.100'. A table at the bottom has columns for 'Q1 Mass (Da)', 'Q3 Mass (Da)', 'Dwell Time (msec)', and 'ID', with one row containing the value '1'.

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Dwell Time (msec)	ID
1			

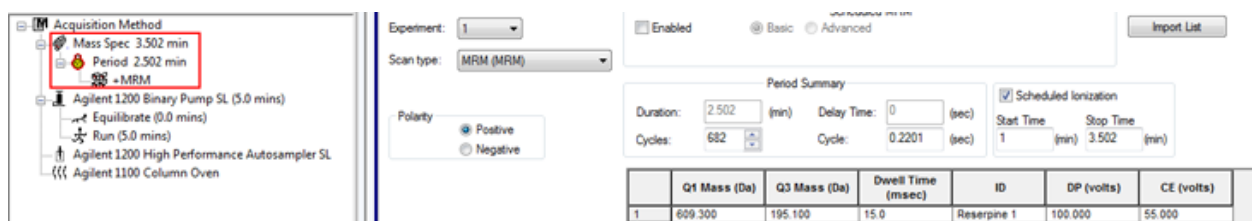
Si **Scheduled Ionization** está seleccionado y están configuradas las horas de **Start Time** y **Stop Time** en **Scheduled Ionization**, entonces **IonSpray Voltage (ISV)** toma el valor de **ISV** especificado en el método de adquisición solo entre las horas de **Start Time** y **Stop Time** en las que se eluyen los picos de interés. El **ISV** está configurado en 0 antes de la hora de **Start time** y después de la hora de **Stop time**. Se debe establecer el método LC como de costumbre. Por ejemplo, cuando la duración de LC se establece en 5 min, y la función de **Scheduled Ionization** se establece para comenzar en 1,5 min y detenerse en 3,5 min, entonces LC comenzará en 0 min y se detendrá en 5 min, la recolección de datos del espectrómetro de masas comenzará en 1,5 min y se detendrá en 3,5 min. **Scheduled Ionization** también se puede utilizar para la **Nebulizer Current (NC)** cuando se usa una fuente de iones Turbo VIonDrive Turbo V en modo APCI.

La hora de **Start Time** y **Stop Time** para un método de adquisición con la función **Scheduled Ionization** seleccionada se debe desarrollar a partir de los datos que se adquirieron con el mismo método de adquisición, pero sin la función **Scheduled Ionization** seleccionada.

Nota: El **Stop Time** debe ser superior al valor de **Start Time**.

Nota: Si la casilla de verificación **Scheduled Ionization** está seleccionada, la hora de **Mass Spec** es **Stop Time**, que corresponde a la hora que se ha programado para que se detenga la ionización. La hora que se muestra junto a **Period** en Acquisition Method Editor es el valor que aparece en el campo **Duration**. Consulte la figura siguiente.

Figura 3-4: Tiempo del espectrómetro de masas cuando se selecciona la ionización programada



Valores de compresibilidad del disolvente

Tabla 3-1: Valores de compresibilidad del disolvente

Disolvente	Compresibilidad (10^{-6} /bar)
Acetona	126
Acetonitrilo	115
Benceno	95
Tetracloruro de carbono	110
Cloroformo	100
Ciclohexano	118
Etanol	114
Acetato de etilo	104
Heptano	120
Hexano	150
Isobutanol	100
Isopropanol	100
Metanol	120
1-Propanol	100
Tolueno	87
Agua	46

Tamaño de la jeringa contra caudal

El caudal de una bomba de jeringa depende de la jeringa instalada en la bomba. Las tablas siguientes muestran la relación entre el caudal y el tamaño de la jeringa.

Tabla 3-2: Tamaño de la jeringa y caudal en l/hora

Tamaño de la jeringa (µl)	Mínimo l/hora	Máximo l/hora
0,5	0,002	23,8
1,0	0,003	47,8
2,0	,006	95,2
5,0	,015	238,0
10,0	,029	474,0
25,0	,073	1193,0

Tabla 3-3: Tamaño de la jeringa y caudal en µl/minuto

Tamaño de la jeringa (µl)	Mínimo µl/minuto	Máximo µl/minuto
50	0,002	39,7
100	,005	79,7
250	,012	197,8
500	,024	397,0
1000	,048	795,0
1,0	,049	805,0

Tabla 3-4: Tamaño de la jeringa y caudal en ml/hora

Tamaño de la jeringa (ml)	Mínimo ml/hora	Máximo ml/hora
2,0	0,011	186,8
2,5	,010	168,2
3,0	0,011	181,4
5,0	,019	317,0
10,0	,028	461,0
20,0	,050	821,0
30,0	,074	1208,0

Tabla 3-5: Tamaño de la jeringa y caudal en ml/minuto

Tamaño de la jeringa (ml)	Mínimo ml/minuto	Máximo ml/minuto
50,0	0,002	28,40
100,0	0,003	47,60
140,0	,004	55,10

Un lote es una colección de información acerca de las muestras que se van a analizar. Las muestras suelen agruparse en conjuntos para simplificar su presentación. Agrupar las muestras en conjuntos también reduce la cantidad de datos que hay que escribir manualmente. Un conjunto consta de una sola muestra o de varias muestras. Todos los conjuntos de un lote utilizan el mismo perfil de hardware. Sin embargo, las muestras de un conjunto pueden tener métodos de adquisición diferentes. Un lote se puede enviar solamente desde una estación de adquisición.

Los lotes cuentan con la siguiente información:

- Información de la muestra, como nombre, id., nombre del archivo de datos y comentarios
- Ubicación del Autosampler (información del bastidor), posición del vial
- Métodos de adquisición y volumen de inyección
- Método de cuantificación (opcional)
- Información de cuantificación (opcional)
- Datos de la muestra personalizados (opcional)
- Información del conjunto.

Editor de lotes

Utilice el editor de lotes para crear o modificar lotes y para crear plantillas de lotes. Para ejecutar muestras, cada una de las cuales utiliza un método de adquisición diferente, emplee varios métodos de adquisición en el mismo conjunto.

También se puede utilizar un método de adquisición como plantilla. Si lo es, se utiliza el mismo método para todas las muestras, pero el usuario puede seleccionar diferentes masas o intervalos de masas para cada muestra. También se puede utilizar el editor de lotes para importar listas de muestras creadas en programas externos, como Microsoft Excel.

El usuario también puede modificar cada detalle del lote antes de enviarlo para su procesamiento. Cuando se envía un lote para su análisis, el usuario puede enviar el lote completo, conjuntos específicos dentro del lote o muestras específicas dentro del conjunto.

Por ejemplo, para analizar diez muestras, cinco utilizando un método de adquisición y cinco utilizando otro método de adquisición distinto, cree un lote de dos conjuntos, uno por cada método empleado.

Nota: Recomendamos que los usuarios revisen todos los parámetros del lote antes de enviar el lote para asegurarse de que las posiciones del vial, placa y gradilla coincidan con la configuración del hardware en el procesador de muestras automático, y la opción de configuración de la gradilla de especificar gradilla esté disponible en el método de adquisición y seleccionada para el procesador de muestras automático en uso.

Nota: Recomendamos que los usuarios se aseguren de que se hayan cargado en el procesador de muestras automático la placa y gradilla correctas, con las ubicaciones correctas, antes de enviar el lote.

Tabla 4-1: Pestañas del editor de lotes

Pestaña	Descripción
Muestra	Se utiliza para crear la lista de muestras y para seleccionar detalles de las muestras, como el nombre de la muestra y el método de adquisición que se utilizará para adquirir la muestra.
Locations	Se utiliza para seleccionar las posiciones de las muestras en el procesador de muestras automático. Las ubicaciones de las muestras se pueden especificar numéricamente en la pestaña Sample. Sin embargo, la pestaña Locations mostrará una representación gráfica para seleccionar las ubicaciones de las muestras.
Cuantificación	Se utiliza para seleccionar los tipos de muestras y concentraciones para los lotes de cuantificación. Como la información de la cuantificación puede especificarse posterior a la adquisición en la tabla de resultados de cuantificación, los usuarios no tienen que utilizar la pestaña Quantitation en el editor de lotes. Se puede utilizar en su lugar el asistente de cuantificación.
Enviar	Se utiliza para verificar la información de la muestra y para enviar las muestras a la cola de adquisición. El gestor de colas muestra el estado de la cola, el lote y la muestra y le permite a los usuarios gestionar las muestras en la cola.

Importación de archivos de lotes

Los usuarios pueden importar un archivo de texto que contenga la información del lote en lugar de crear un lote en el Batch Editor. Si todos los detalles de la muestra están en una hoja de cálculo, es más rápido reordenar e importar los datos en la hoja de cálculo que escribir manualmente los datos en Batch Editor.

Antes de importar la información del lote desde un archivo de texto, asegúrese de que la disposición y el formato de los datos del archivo sean correctos. En concreto, los encabezados de columna de la hoja de cálculo deben coincidir con los encabezados de columna del Batch Editor. Para asegurarse de que el archivo de texto incluye los encabezados adecuados, debe crear un lote mediante el editor de lotes, exportarlo como archivo de texto, escribir los valores adecuados en un editor de hojas de cálculo y, a continuación, volver a importar el archivo al editor de lotes.

Para obtener ejemplos de archivos con el formato correcto, consulte la carpeta de lotes en el proyecto de ejemplo.

La información de un archivo de lotes también se puede exportar para su uso en otras aplicaciones, como Microsoft Excel, Microsoft Access y determinados programas de Sistema de Gestión de Información para Laboratorio (LIMS).

Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor (opcional)

Si se utiliza un método de cuantificación con un lote y no desea seleccionar detalles de cuantificación después de la adquisición, los detalles de cuantificación (tipo de muestra, concentración de la muestra) deben definirse antes de enviar el lote.

Las columnas **Internal Standard** y **Standard** correspondientes se muestran en la pestaña Quantitation, en función del método de cuantificación seleccionado en la pestaña Sample.

1. Con un archivo de lote abierto en la ventana Batch Editor, abra la pestaña Quantitation.
2. Seleccione el conjunto que contenga las muestras.
3. Seleccione un **Quant Type**, **Dilution Factor** y **Weight/Volume** para todas las muestras en la lista de la celda.
4. (Si es necesario) En la columna **Analyte**, escriba la concentración del analito.
5. (Si es necesario) En la columna **Internal Standard**, escriba la concentración interna estándar.
6. Repita este procedimiento para cada conjunto del lote.

Los usuarios pueden ver la información contenida en un archivo de datos en formato de tabla o de gráfico. Los datos gráficos se presentan como cromatograma o como espectro. Los datos en cualquiera de estos formatos se pueden mostrar como una tabla de puntos de datos y es posible realizar varias operaciones de clasificación sobre los datos.

El software almacena los datos TIC y del método en archivos wiff, y almacena datos del espectro en archivos wiff.scan. El software necesita tanto los archivos wiff como los wiff.scan para abrir el archivo de datos. Además, el software puede abrir archivos txt, que contienen datos de solo una muestra. Cuando se abre un archivo de datos en el software, se muestran diferentes paneles en función del tipo de experimento realizado.

Si se selecciona la casilla de verificación MCA en el editor del método de ajuste, el archivo de datos abre un espectro de masas. Si no se selecciona la casilla de verificación MCA, el archivo de datos abrirá un cromatograma de iones totales (TIC). Los usuarios pueden seleccionar un intervalo y hacer doble clic en el panel de TIC en un punto temporal determinado para mostrar el espectro para este intervalo.

Cromatogramas

Un cromatograma muestra la variación de cierta cantidad en relación al tiempo en un experimento repetitivo. Por ejemplo, si el espectrómetro de masas se programa para repetir varias veces un conjunto dado de análisis de espectro. Los datos cromatográficos son contiguos, incluso si la intensidad de los datos es cero. El espectrómetro de masas no genera directamente los cromatogramas, sino que estos se generan a partir de espectros.

En la vista de cromatograma, la intensidad, en recuentos por segundo (cps), se representa en el eje Y, en relación con el tiempo en el eje X. Los picos se marcan automáticamente.

En el caso de LC/MS, el cromatograma se muestra a menudo como una función de tiempo, el tiempo en el cual se ha obtenido un análisis determinado, que puede derivarse del número de análisis.

Un cromatograma aporta una vista general de los datos, normalmente dependiente del tiempo cuando se utiliza una columna LC, pero proporciona información acerca de los componentes de un pico. Por ejemplo, si bien un cromatograma puede mostrar únicamente un pico, ese pico puede representar más de un compuesto, es decir, masas diferentes.

Los datos cromatográficos pueden cambiar tanto en tiempo como en intensidad si cambian las condiciones cromatográficas de una muestra determinada.

Espectros

Un espectro son los datos que se obtienen directamente del espectrómetro de masas y normalmente representa el número de iones detectados en función de su relación entre masa y carga (m/z). Se muestra como un gráfico con los valores m/z representados en el eje X y la intensidad (cps) representada en el eje Y.

En los espectros de MRM, la intensidad está relacionada con dos masas, la masa del ion precursor (Q1) y la masa o masas del ion producto (Q3).

Cuando los datos se visualizan en un espectro, se obtiene la información específica de la masa para un compuesto. Un espectro proporciona los valores de m/z para los iones correspondientes a un pico cromatográfico específico. Estos iones se pueden utilizar para encontrar información más específica. Por ejemplo, un espectro muestra todas las masas que conforman un pico, incluida la intensidad de cada masa.

Las intensidades de espectro pueden cambiar, pero el valor de m/z es fijo porque la masa de un compuesto no cambia.

Hay dos formas de generar datos de espectro:

- Si solo se adquiere un análisis o se utiliza MCA para la adquisición, los datos se muestran como un espectro.
- A partir de un cromatograma.

Sustracción de fondo

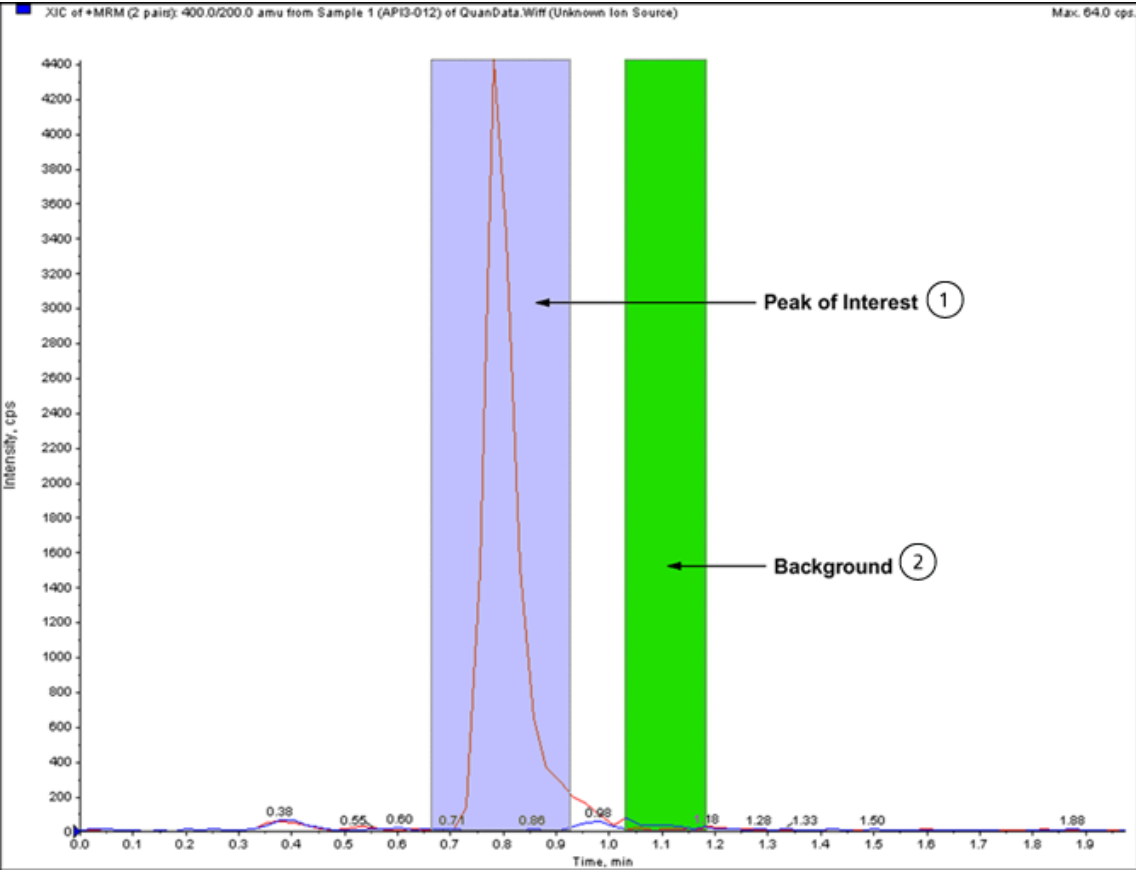
La sustracción de fondo reduce la cantidad de ruido en un espectro, de la siguiente forma: restando uno o dos intervalos que contienen ruido de un intervalo que contiene un pico. Los usuarios pueden mover los intervalos de manera independiente, o bloquearlos y moverlos como una entidad única dentro del gráfico para optimizar el aislamiento del pico o para aislar otro pico. El ajuste predeterminado es la sustracción de fondo bloqueada. El software ofrece diversos métodos de sustracción de fondo.

Background Subtract: los usuarios pueden utilizar la sustracción de fondo para aislar un pico de interés. Los usuarios pueden resaltar y sustraer hasta dos intervalos seleccionados de un pico. Los usuarios también pueden bloquear los intervalos y moverlos dentro del gráfico con el fin de optimizar el aislamiento del pico o para aislar otro pico.

Ejecución de una sustracción de fondo en un cromatograma

1. Abra un archivo de datos.
2. Seleccione un intervalo de fondo en el cromatograma.
3. Pulse la tecla **Shift** y, a continuación, seleccione otro rango de fondo.

Figura 5-1: XIC



Elemento	Descripción
1	Pico de interés
2	Fondo

- Para establecer el rango de sustracción, haga clic en **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**.
- Seleccione el pico de interés.
- Haga clic en **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**. El fondo se sustrae del pico y se genera un espectro nuevo.
- Para aislar otro pico, arrastre los intervalos bloqueados en el cromatograma y repita la sustracción de fondo.

Sugerencia: Para borrar la región de sustracción de fondo, haga clic en **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

- Para guardar el espectro sustraído del fondo como archivo de datos procesados, haga clic en **File > Save Processed Data File**.

Desbloquear los intervalos

Requisito previo
<ul style="list-style-type: none">El intervalo de sustracción seleccionado está definido como bloqueado.

Haga clic en **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Los intervalos se desbloquean y cada uno puede moverse de manera independiente.

Sustracción de línea base

La sustracción de línea de referencia elimina una desviación constante o que varía lentamente de un conjunto de datos. Esta función es útil para localizar picos pequeños que están ocultos por el ruido. El software utiliza el algoritmo siguiente al realizar la sustracción de línea de referencia.

- Cada punto de datos del conjunto de datos se considera como el centro de una ventana (en masa o tiempo) con una anchura definible por el usuario en amu o minutos.
- Se localizan los valores mínimos a cada lado del punto de datos actual (mínimos) dentro de la ventana.
- Se fija una línea recta entre los dos mínimos y se calcula la altura (intensidad) del punto de datos actual por encima de la línea. Los puntos finales de los datos se consideran como mínimos.
- El punto de datos se sustituye con el nuevo valor calculado.

Calculadoras

Utilice una calculadora para realizar cálculos a partir de los datos recopilados. Aunque la calculadora es una ventana independiente, está conectada al gráfico activo dentro del software.

Están disponibles las siguientes calculadoras:

- [Calculadora de composición elemental](#)
- [Calculadora Hypermass](#)
- [Calculadora de focalización elemental](#)
- [Calculadora de propiedad de masa](#)
- [Calculadora de distribución isotópica](#)

Los usuarios pueden cortar y pegar de un cuadro de texto a otro entre las diferentes ventanas de las calculadoras. Se pueden imprimir los datos desde cualquiera de las calculadoras haciendo clic en el icono **Print** en la esquina superior izquierda de la ventana. Para obtener más información sobre el uso de las calculadoras, consulte la Ayuda.

Los datos de las calculadoras Composición elemental, Propiedad de masa y Distribución isotópica pueden exportarse a un archivo independientemente. Utilice la calculadora de

Focalización elemental para modificar los datos dentro del gráfico activo. Los datos de las calculadoras Hypermass y distribución isotópica pueden superponerse sobre el espectro activo.

Sugerencia: Ajuste la precisión de los datos de la calculadora en la pestaña Calculators en el cuadro de diálogo Appearance Options. Para abrir el cuadro de diálogo, haga clic en **Tools > Settings > Appearance Options**.

Calculadora de composición elemental

La calculadora de Composición elemental determina las composiciones moleculares o de aminoácidos potenciales basándose en una relación masa-carga objetiva. Escriba esta relación manualmente o selecciónela desde un espectro activo. Esta calculadora crea una tabla con las posibles combinaciones de elementos o aminoácidos completando la masa de interés y las características de cada uno.

Escriba o seleccione valores para parámetros como tolerancia, estado de electrones y número de cargas. Los usuarios también pueden escribir una lista de elementos posibles y poner un límite a la cantidad de cada uno.

Calculadora Hypermass

La calculadora Hypermass determina la distribución de un sobre de carga múltiple basándose en una masa no cargada. Los usuarios pueden seleccionar la masa no cargada, incluyendo el aducto y su polaridad.

La calculadora muestra una representación gráfica de la serie Hypermass, que puede superponerse en el espectro activo. También está disponible una lista de los datos de Hypermass.

Calculadora de focalización elemental

La calculadora de Focalización elemental reduce el espectro de los datos basándose en un patrón específico, principalmente uno que corresponde a distribuciones isotópicas. También puede buscar en un espectro de datos MS un patrón específico de picos, que puede introducirse como una fórmula o como una distribución isotópica.

Si la calculadora encuentra una coincidencia, esta crea un gráfico reducido que solo contiene datos que pertenecen al patrón especificado. Para un espectro, la calculadora elimina todos los datos que no coinciden. Para un cromatograma, la calculadora calcula el objetivo elemental para cada uno de los espectros subyacentes y regenera cada punto del cromatograma en base a estos nuevos espectros.

Calculadora de propiedad de masa

La calculadora de Propiedad de masa determina varias propiedades, como masa exacta, masa promedio, precisión de masa y defecto de masa de una masa de interés. Los resultados generados por esta calculadora dependen del número de campos de entrada que se completen.

Calculadora de distribución isotópica

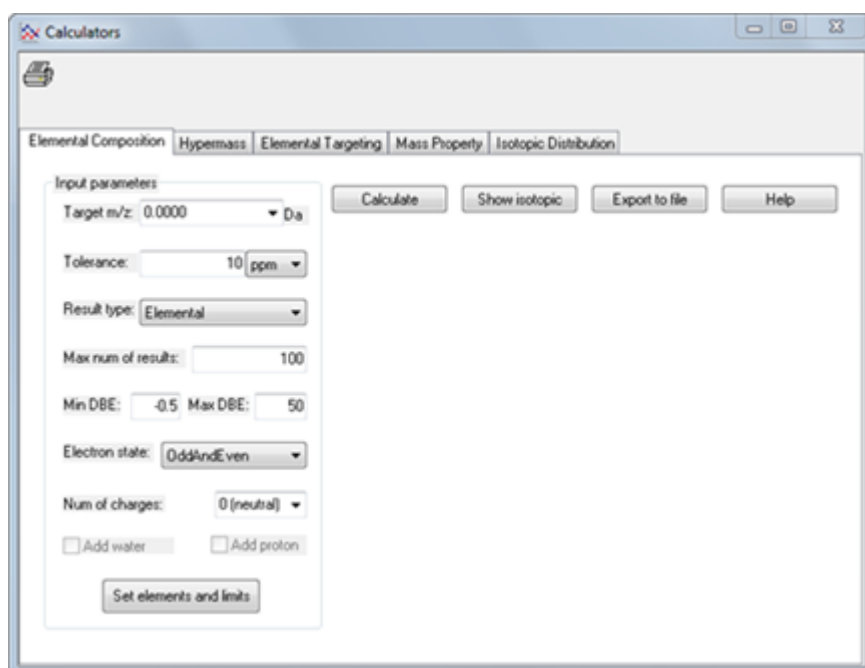
La calculadora de Distribución isotópica determina la distribución isotópica basándose en una fórmula introducida. Esto permite a los usuarios distinguir entre compuestos con la misma masa basándose en las intensidades relativas de los isótopos.

La distribución isotópica calculada puede mostrarse en formato gráfico o texto en el panel de distribución isotópica, superpuesto al espectro activo, o exportarse a un archivo separado.

Acceso de las calculadoras

Haga clic en **Tools > Calculators**.

Figura 5-2: Cuadro de diálogo de las calculadoras



Se abre el cuadro de diálogo Calculators.

Picos del centroide

Calcular el centroide de un pico convierte los valores de distribución de picos en un valor único de m/z e intensidad que representa el pico. Los datos de centroide recogidos en el modo de perfil simplifican los datos y reducen el tamaño del archivo. Los datos de centroide proporcionan una asignación de picos más precisa y reducen la cantidad de datos, aunque también eliminan la información sobre la forma de los picos.

El algoritmo de centroide convierte los picos en valores individuales mediante el uso del promedio ponderado de intensidad para calcular el centro de gravedad del pico. El resultado del algoritmo es una lista de picos con parámetros, como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 5-1: Parámetros de picos

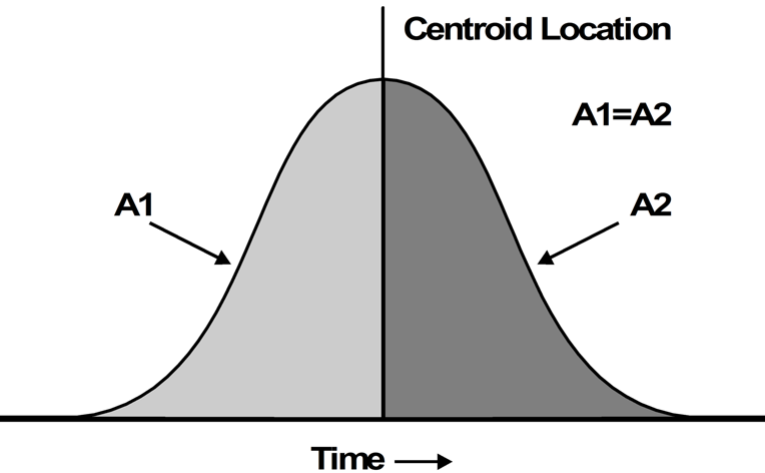
Parámetro	Definición
Centroid Value	El valor de los datos del centroide en unidades de masa o tiempo.
Intensity	La intensidad de cada pico, expresada en cps.
Width	La anchura del pico del centroide, expresada en Da.

Los datos se calculan automáticamente como un centroide cuando se agregan a la biblioteca o cuando se realiza una búsqueda.

Calcular el centroide de un pico

- 1. Seleccione un panel que contenga un espectro.
El cálculo del centroide del pico cambia el aspecto del gráfico existente. Para comparar el resultado con los datos originales, realice una copia del gráfico antes de calcular el centroide.
- 2. Haga clic en **Explore > Centroid**.
Se crea un centroide de los datos.

Figura 5-3: Ubicación del centroide del analito



Análisis de datos

Los usuarios pueden abrir archivos que contengan datos existentes o datos que se están adquiriendo actualmente. Todos los datos relacionados con el experimento pueden verse también en formato tabular. El panel de la tabla se compone de dos pestañas, Data List y Peak List. La pestaña Data List contiene información relativa al experimento, como el tiempo de adquisición y la intensidad del análisis. La pestaña Peak List contiene información relacionada con los picos, como la altura de pico, el área de pico y el tipo de punto de referencia.

Cromatograma de iones totales

Un cromatograma de iones totales (TIC) se crea mediante la suma de las contribuciones de intensidad de todos los iones de una serie de exploraciones de masa. Los usuarios pueden utilizar el TIC para ver un conjunto de datos completo en un único panel. Es la suma de las intensidades de todos los iones de un análisis, representada en función del tiempo en un panel cromatográfico. Si los datos contienen resultados de varios experimentos, el usuario puede crear TIC individuales para cada experimento y otro TIC que represente la suma de todos los experimentos. El TIC predefinido que representa la suma de todos los experimentos se muestra con una herramienta divisora debajo del centro del eje X.

Cromatograma de iones extraídos

Cromatograma de iones extraídos (XIC) se crea al tomar los valores de intensidad de un valor de masa discreta individual, o un rango de masas, de una serie de análisis de espectro de masas. Muestra el comportamiento de una masa determinada, o un rango de masas, como una función de tiempo. La intensidad del ion, o la suma de las intensidades de todos los iones de un intervalo determinado, se representa en un panel cromatográfico.

Base Peak Chromatogram

Un cromatograma de pico base (BPC) muestra la intensidad del ion más intenso de cada análisis como una función del número de análisis o tiempo de retención. Es útil en instancias en las que el TIC contiene tanto ruido que hay una gran desviación y resulta muy difícil distinguir los picos cromatográficos. También ayuda a distinguir entre componentes coeluidos. Los BPC se pueden generar únicamente a partir de datos de periodos y experimentos individuales.

El gráfico utiliza dos colores, que se alternan cada vez que cambia la masa del pico de base. Los cambios de color se mantienen cuando se manipulan los datos al realizar desplazamientos o aplicar zoom. Para obtener más información acerca de la selección de los colores utilizados en el gráfico, consulte la Ayuda.

Cromatogramas de longitud de onda extraída

Un cromatograma de longitud de onda extraída (XWC) es un cromatograma de longitud de onda que se crea tomando los valores de intensidad de una única longitud de onda o la suma de la absorbencia de un rango de varias longitudes de onda.

Detector de diodos en serie

Los usuarios pueden ver el espectro de detector de diodos en serie (DAD) de un único punto temporal o de un rango de tiempo como un cromatograma de longitud de onda total.

Cromatograma de longitud de onda total

Un cromatograma de longitud de onda total (TWC) es un cromatograma que se utiliza con menor frecuencia. Estos cromatogramas reflejan la absorbencia total (mAU) como una función de tiempo. El TWC proporciona un método para visualizar un conjunto de datos completo en un único panel. Es la suma de la absorbencia de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un panel cromatográfico. Si los datos contienen

resultados de varios experimentos, el usuario puede crear TWC individuales para cada experimento y otro TWC que represente la suma de todos los experimentos.

Superposición de gráficos

Se pueden comparar visualmente dos o más conjuntos de datos mediante la superposición de los gráficos creados con métodos similares. Una vez superpuestos, cada espectro se diferencia por el color del trazo. En el caso de los datos de análisis completos, los usuarios pueden visualizar las diferencias entre los espectros de varias muestras.

Si se escoge uno o más paneles, entonces cada XIC se abrirá en un panel distinto.

Sugerencia: Para superponer menos de cuatro gráficos en el mismo panel, pulse **Ctrl**, haga clic con el botón derecho en un panel y, a continuación, haga clic en **Appearance Options**. En el cuadro de diálogo Appearance Options, en la pestaña Multiple Graph Options, seleccione **Yes** en el campo **Overlay Multiple Panes** de **Spectrum** y **Chromatogram**.

1. Seleccione el primer panel para superponer.
2. Haga clic en **Explore > Overlay**.
3. Haga clic en el segundo panel.

Los gráficos se superponen y los dos trazos se muestran en colores diferentes.

Sugerencia: Para ver una lista codificada por colores de los gráficos superpuestos, haga clic con el botón derecho en la barra de título del panel.

Alternancia entre gráficos superpuestos

1. Seleccione un panel que contenga gráficos superpuestos.
2. Haga clic en **Explore > Cycle Overlays**.
La vista cambia para que el gráfico siguiente de la secuencia se muestre en primer plano.

Sumar superposiciones

Si dos o más gráficos han quedado superpuestos, puede sumar los gráficos para obtener un nuevo trazo. Cada punto del nuevo trazo es la suma de los puntos de los gráficos. La suma de varias superposiciones de tipos de datos similares puede facilitar y acelerar las posteriores operaciones de procesamiento. Por ejemplo, los usuarios pueden superponer varios XIC, sumarlos y, a continuación, suavizar la superposición sumada para eliminar el ruido.

La suma de superposiciones es similar a la generación de TIC, con la ventaja de poder seleccionar qué gráficos se van a superponer. Por ejemplo, si se estaban consultando diez experimentos, el TIC agregará los diez experimentos juntos. Si se suman superposiciones, los usuarios tendrán la opción de agregar solo nueve de los diez gráficos superpuestos. Se puede utilizar este procedimiento si los datos recopilados en el experimento uno son solo ruido.

1. Superponga los gráficos que no se vayan a sumar.

2. Haga clic en **Explore > Sum Overlays**.
Los gráficos superpuestos se sumarán.

Personalizar los gráficos

Los gráficos se pueden personalizar utilizando el estilo predefinido de las etiquetas, etiquetas de texto o textos en gráficos y cromatogramas. Los usuarios pueden seleccionar las fuentes que se utilizarán en las etiquetas de picos y ejes, así como los colores que se utilizarán en los trazos. Los usuarios también pueden agregar etiquetas de eje y especificar el tipo de etiqueta y precisión de los picos.

Adición de etiquetas de texto a un gráfico

Utilice etiquetas de texto para etiquetar picos de interés o puntos importantes en el gráfico. Cuando se coloca una etiqueta de texto junto a un pico, esta permanece junto al pico cuando se amplía o reduce el tamaño del gráfico. Las etiquetas de texto también permanecen con la muestra original cuando los usuarios se desplazan por las muestras de un archivo de datos. Una etiqueta de texto contiene una línea de texto con un máximo de 128 caracteres.

1. En el espectro, haga clic con el botón derecho y, a continuación, haga clic en **Add Caption**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add Caption.
2. En el cuadro **Caption**, escriba el texto.
3. Para cambiar el tamaño y el estilo de la etiqueta de texto, haga clic en **Font**.
4. Para colocar la etiqueta de texto, haga clic en **OK**.

Sugerencia: Si la posición de la etiqueta de texto no es la deseada, arrastre la etiqueta a otra posición. La etiqueta de texto permanece en el mismo lugar con respecto a los ejes X e Y cuando se amplía o reduce el tamaño del gráfico. Para editar o eliminar una etiqueta de texto específica, haga clic con el botón derecho en ella y, a continuación, seleccione el comando adecuado.

Adición de texto a un gráfico

Utilice texto para añadir varias líneas de información a un gráfico. A diferencia de las etiquetas de texto específicas, que se asocian con un pico específico y se mueven con él cuando se amplía el gráfico, las etiquetas de texto permanecen en su ubicación original al hacer zoom en el gráfico. No permanecen con la muestra original cuando los usuarios se desplazan por las muestras de un archivo de datos.

1. En el gráfico, haga clic con el botón derecho y seleccione **Add User Text**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add User Text.
2. En el campo **User Text**, escriba el texto.
3. Para centrar el texto, seleccione la casilla de verificación **Center Text**.
4. Para cambiar el tamaño y el estilo de la etiqueta de texto específica, haga clic en **Font**.

5. Para insertar el texto, haga clic en **OK**.

Sugerencia: Si la posición del texto no es la deseada, arrastre el texto a otra posición. Para editar o eliminar el texto, haga clic con el botón derecho en el texto y seleccione el comando adecuado.

Base de datos de compuestos

La base de datos de compuestos almacena información sobre los compuestos, incluyendo las especificaciones de optimización. Utilice la base de datos de compuestos cuando haya un número elevado de muestras y un número elevado de compuestos que necesiten una optimización rápida. La ventana de la base de datos de compuestos almacena las condiciones de optimización para los compuestos, que pueden recuperarse para ejecutar las muestras. Para obtener más información, consulte el documento *Help*.

Gráficos de contorno

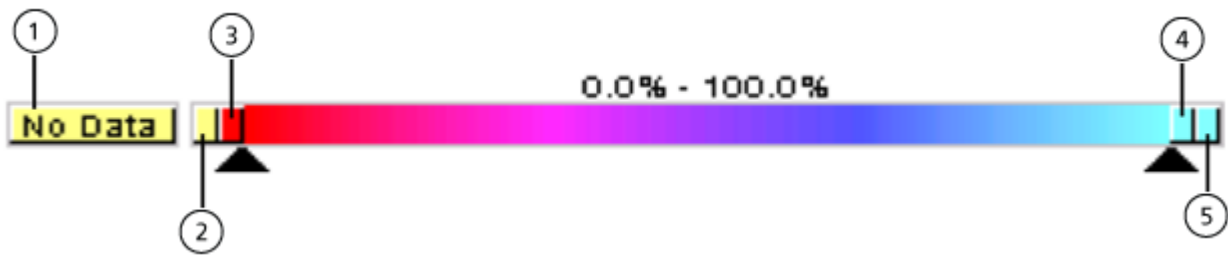
Un gráfico de contorno es un gráfico codificado con colores de un conjunto de datos completo que utiliza los colores para representar una tercera dimensión en el gráfico. En un gráfico de contorno de un TIC, el eje X representa el tiempo de retención o número de análisis, el eje Y representa la masa y el color representa la intensidad de los datos en ese punto. En un gráfico de contorno de un TWC para datos de DAD, el eje X representa el tiempo de retención o número de análisis, el eje Y representa la longitud de onda y el color representa la absorbancia. El gráfico de contorno es una herramienta postadquisición que no funciona en una adquisición de análisis en tiempo real.

Nota: El gráfico de contorno no es compatible con análisis MI o MRM, pero sí lo es con análisis de DAD.

El color es el tercer eje en un gráfico de contorno y representa la intensidad o la absorbancia. Los usuarios pueden cambiar los valores de intensidad o absorbancia superior o inferior en el gráfico de contorno, mediante los triángulos de control de la barra de color situada sobre el gráfico de contorno. Los parámetros porcentuales de la parte superior del panel Contour Plot indican los valores representados por los controles deslizantes de los valores superior e inferior. Los valores reales se basan en un porcentaje de la intensidad o absorbancia máximas en la región seleccionada. El valor se muestra en la esquina superior derecha del panel Contour Plot.

Los controles mostrados en la siguiente figura cambian los colores de un gráfico de contorno.

Figura 5-4: Botones que controlan los colores del gráfico de contorno



Elemento	Descripción
1	No hay datos
2	Menos que pocos datos
3	Pocos datos
4	Muchos datos
5	Más que muchos datos

Los usuarios pueden definir los colores de un gráfico de contorno para proporcionar un mejor contraste y mostrar especificaciones de los datos según sus necesidades. Por ejemplo, si define la intensidad/longitud de onda y cambia el color de los valores de **Below Low Data** y **Above High Data**, puede eliminar ruido de fondo en un gráfico de contorno.

Los botones **Below Low Data** y **Above High Data** contraen o amplían la barra de colores si mueve los controles deslizantes. Cuando se cambian los colores del gráfico de contorno, los nuevos colores se convierten en los colores predefinidos para todos los gráficos siguientes.

Tabla 5-2: Menú contextual de los paneles de gráficos de contorno

Comando	Función
Show DAD Spectrum	(Mostrar espectro DAD)Abre un nuevo panel con el espectro DAD.
Extract Wavelengths (Use Range)	(Extraer longitudes de onda [Rango de uso])Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para mostrar el XWC.
Extract Wavelengths (Use Maximum)	(Extraer longitudes de onda [utilizar el máximo])Extrae rangos de longitudes de onda utilizando las longitudes de onda máximas.
Zoom to selection	(Zoom a la selección)Amplía el área seleccionada.
Add User Text	(Agregar texto de usuario)Agrega un recuadro de texto en la posición del cursor.
Undo Zoom	(Alejar)Devuelve el gráfico a la escala original.

Tabla 5-2: Menú contextual de los paneles de gráficos de contorno (continuación)

Comando	Función
Delete Pane	(Eliminar panel)Elimina el panel seleccionado.
Show Cross-Hair	(Mostrar puntero de cruz)Muestra el puntero de cruz (nm/min).

Ver un gráfico de contorno

Un gráfico de contorno solo puede verse después de la adquisición. Los usuarios pueden ver un gráfico de contorno desde los gráficos TIC, XIC, TWC o XWC. Los TIC y XIC están disponibles para todos los archivos de datos wiff. Los TWC y XWC están disponibles solo para los datos adquiridos por un DAD o PDA.

1. En el modo Explore, abra un archivo de datos como gráfico TIC, XIC, TWC o XWC.
2. Resalte el rango que vaya a ver en el gráfico de contorno. Si no se selecciona nada, se ve el rango completo.
3. Haga clic en **Explore > Show > Show Contour Plot**.
Se abre un gráfico de contorno de la región seleccionada en un panel diferente.

Sugerencia: Para cerrar un panel de Gráfico de contorno, haga clic con el botón derecho del ratón en el panel Contour Plot y luego haga clic en **Delete Pane**.

Selección de una región en un gráfico de contorno

Para ampliar una selección concreta o ver el espectro de masas correspondiente de esa selección, realice una de las siguientes acciones:

- Para seleccionar una región estándar en un recuadro, arrastre el puntero para crear un recuadro alrededor de una región del gráfico de contorno.
- Para realizar una selección vertical, pulse **Ctrl** y, a continuación, arrastre el puntero verticalmente.
- Para realizar una selección horizontal, pulse la barra espaciadora y arrastre el puntero horizontalmente.

Definición de la intensidad y la absorbencia en un gráfico de contorno

Realice una de las siguientes acciones:

- Para definir el valor inferior de intensidad/absorbencia en un gráfico de contorno, arrastre el control deslizante triangular izquierdo de la barra de colores situada sobre el gráfico de contorno hasta la posición requerida.

El gráfico de contorno ajusta automáticamente el color de los valores por debajo del valor definido para indicar que se encuentran fuera de rango.

- Para definir el valor superior de intensidad/absorbencia en un gráfico de contorno, arrastre el control deslizante triangular derecho de la barra de colores situada sobre el gráfico de contorno hasta la posición requerida.

El gráfico de contorno ajusta automáticamente el color de los valores por encima del valor definido para indicar que se encuentran fuera de rango.

Cambiar los colores de un gráfico de contorno

Sugerencia: Mediante la paleta Define Custom Colors, los usuarios pueden crear colores personalizados para utilizar en un gráfico de contorno.

1. En el panel Contour Plot, haga clic en uno de los botones de color.
Se abrirá el cuadro de diálogo Color.

Nota: Hay cinco botones que controlan el color en un gráfico de contorno. Se muestra el nombre de cada uno cuando se mantiene el cursor sobre el botón. Esto garantiza que se cambie la característica correcta. Además, los botones Below Low Data y Above High Data se reducen o amplían en la barra de colores si el usuario mueve los controles deslizantes. Después de que el usuario haya cambiado los colores del gráfico de contorno, este se convierte en los colores predeterminados para todos los gráficos posteriores.

2. Haga clic en un color.
3. Haga clic en **OK**.
El gráfico cambia para reflejar el cambio de color.

Algoritmo Dynamic Background Subtraction

El algoritmo Dynamic Background Subtraction mejora la detección de iones precursores en un experimento de adquisición dependiente de información (IDA). Cuando se activa el algoritmo, IDA utiliza un espectro al que se ha sustraído el fondo para seleccionar el ion precursor de interés para el análisis MS/MS, en lugar de seleccionar el precursor en el espectro de estudio directamente. Puesto que este proceso tiene lugar durante el análisis LC, el algoritmo permite la detección de especies a medida que aumenta la intensidad de sus señales. En consecuencia, este algoritmo se centra en la detección y análisis de los iones precursores en la sección creciente del pico de LC, hasta o ligeramente por encima de la parte superior de los picos de LC.

Interpretación de fragmentos

La herramienta Fragment Interpretation ayuda al usuario a interpretar datos MS/MS. La herramienta Fragment Interpretation genera una lista de masas de fragmentación teórica a partir de la escisión de los enlaces no cíclicos individuales de una estructura molecular. La estructura molecular se puede crear en un programa de dibujo de terceros y, a continuación, guardarla como un archivo mol. La herramienta puede cotejar entonces la lista teórica con los picos en el espectro de masas actual. La herramienta Fragment Interpretation muestra los fragmentos teóricos en la lista de fragmentos y compara las masas de fragmentación con los picos del espectro de masas. Los picos que sobrepasan el umbral de intensidad y

se encuentran dentro de la tolerancia de masa definida por el usuario para las masas de fragmentación (2 Da como máximo) se consideran coincidentes y se muestran en negrita en la lista de fragmentos.

Nota: La herramienta Fragment Interpretation no se puede utilizar con los siguientes tipos de análisis:

- Ion precursor
 - Pérdida neutra
 - Ion múltiple Q1
 - Ion múltiple Q3
 - Monitorización de reacciones múltiples (MRM)
-

Conectar la herramienta Fragment Interpretation a un espectro

Cuando seleccione un enlace no cíclico individual en la estructura molecular, la herramienta Fragment Interpretation resalta los dos fragmentos creados al dividir el enlace y muestra los picos coincidentes en el espectro vinculado.

Si se están visualizando varios paneles de espectro, la herramienta Fragment Interpretation se vincula al espectro activo. Si el archivo de datos contiene más de una muestra, la herramienta Fragment Interpretation se vincula al espectro activo.

Si se abre un espectro con la herramienta Fragment Interpretation abierta, entonces el panel activo se vincula automáticamente al espectro abierto.

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. En la esquina inferior derecha del panel de interpretación de fragmentos, haga clic en el botón de vinculación.
El puntero cambia para mostrar a la herramienta de vinculación.
3. Haga clic en el gráfico de espectro al que desee vincular la herramienta Fragment Interpretation.
El indicador de gráfico vinculado de la esquina inferior izquierda contiene el nombre del gráfico vinculado con el panel de interpretación de fragmentos. La vinculación se interrumpe cuando se cierra el gráfico o la herramienta Fragment Interpretation. Si el archivo wiff vinculado tiene más de una muestra, entonces el panel Fragment Interpretation se actualiza automáticamente a medida que los usuarios se desplazan por las muestras.

Correspondencia de fragmentos con picos

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un archivo mol abierto en el panel Fragment Interpretation, seleccione una celda resaltada en negrita en la lista Fragment List.

En el espectro, el software resalta el pico de espectro coincidente en el color seleccionado en la pestaña Options. En la estructura molecular, se resalta el enlace.

3. Si se hace clic en una fila que tiene más de un fragmento coincidente, el pico del espectro más próximo a su masa monoisotópica se resaltará en el espectro de masas en el color especificado en la pestaña Options.

Selección de un enlace en una estructura molecular

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un archivo mol abierto en el panel Fragment Interpretation, haga clic en un enlace no cíclico individual de la estructura molecular.

Los dos fragmentos resultantes se muestran resaltados en la lista de fragmentos. Las masas de los dos fragmentos se muestran a un lado u otro del enlace.

Si hay un espectro vinculado, la herramienta Fragment Interpretation muestra todos los picos coincidentes en el gráfico. Si selecciona un fragmento en la lista y el fragmento se corresponde con un pico, la ventana Fragment Interpretation se ampliará sobre ese pico.

Visualización de isótopos

La herramienta Fragment Interpretation puede mostrar la distribución isotópica teórica de un pico que coincida con un fragmento de la lista de fragmentos.

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. En el panel Fragment Interpretation, haga clic en la pestaña **Options**.
3. Active la casilla de verificación **Show Isotopes**.
4. Haga clic en **Apply**.
5. En la lista de fragmentos, seleccione un fragmento que coincida con un pico. La distribución isotópica de los picos coincidentes se muestra en el espectro.

Mostrar la diferencia entre fórmulas en un espectro

Se puede mostrar la diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas de dos fragmentos hipotéticos relacionados. La diferencia entre fórmulas se muestra cuando se seleccionan dos picos. La diferencia entre fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra cuando se seleccionan dos fragmentos o dos enlaces no cíclicos individuales.

1. Haga clic en un pico de fragmento.
2. Pulse la tecla **Shift** y, a continuación, haga clic en otro pico de fragmento. Si la diferencia entre las fórmulas es igual a un fragmento de la lista de fragmentos, el fragmento se resalta en la lista. En caso contrario, la diferencia entre las fórmulas de los fragmentos coincidentes de los picos se muestra en un cuadro de mensaje.

Visualización de diferencias de fórmula en la lista de fragmentos

1. Haga clic en el número de fila de un fragmento.
2. Pulse la tecla **Ctrl** y, a continuación, haga clic en otro fragmento.
La diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra en un cuadro de mensaje si los fragmentos están relacionados.

Visualización de diferencias de fórmula en una estructura molecular

1. Haga clic en un enlace no cíclico individual. Se selecciona el fragmento predeterminado (de los dos fragmentos resaltados). Para seleccionar el otro fragmento del enlace escindido, pulse **Ctrl** y, a continuación, haga clic en el enlace.
2. Seleccione un segundo enlace no cíclico. Para seleccionar el fragmento predefinido, pulse la tecla **Shift** y, a continuación, haga clic en el enlace. Para seleccionar el otro fragmento del enlace escindido, pulse **Ctrl + Shift** y, a continuación, haga clic en el enlace.
La herramienta Fragment Interpretation calcula la diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas del fragmento seleccionado en el paso 1 y el fragmento seleccionado en el paso 2, si los fragmentos están relacionados. La diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra en el cuadro de mensaje.

Explorador IDA

El explorador de adquisición dependiente de información (IDA) se utiliza para mostrar datos adquiridos mediante un método IDA.

El explorador IDA puede desactivarse y activarse accediendo a la pestaña IDA Explorer en el cuadro de diálogo Appearance Options. En esta pestaña se pueden definir también las columnas que se muestran en la vista de listas.

La parte izquierda del visor que aparece en la siguiente figura muestra las masas sobre las que se ha realizado un análisis de ion producto. En esta área, los usuarios pueden examinar en una vista de lista o de árbol la masa, la intensidad, el tiempo y la energía de colisión de los iones en los que se realizaron análisis de iones del producto. En la vista de lista, la lista se puede ordenar haciendo doble clic sobre cualquier encabezado de una columna. Utilice el cuadro de diálogo Appearance Options para personalizar las columnas de la vista de lista.

En la parte derecha el visor está dividido en cuatro paneles. El panel superior izquierdo muestra los datos TIC de estudio. El panel inferior izquierdo muestra el XIC de la masa. El panel superior derecho muestra el estudio o el estudio alternando con los análisis de resolución mejorada (ER), y el panel inferior derecho muestra el análisis de producto.

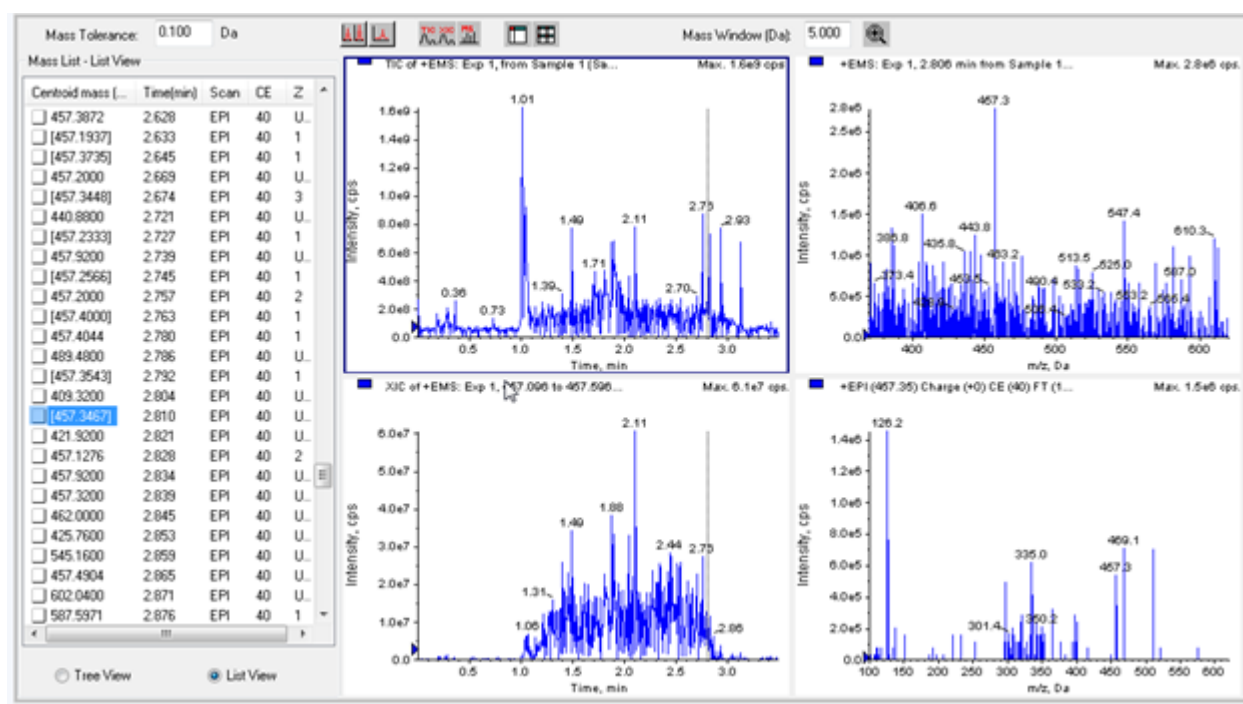
El visor IDA enumera todas las masas sobre las que se han llevado a cabo análisis de ion producto mejorado (EPI) o tipos de análisis ER. En el visor IDA los usuarios pueden realizar lo siguiente:

Análisis de datos cualitativos

- Hacer clic sobre una masa en la vista de lista o de árbol para mostrar los gráficos correspondientes a esta masa.
- Visualizar el espectro de estudio en el cual se ha identificado la masa y el espectro de producto de esa masa.
- Mostrar el TIC del análisis de estudio y el XIC de cada masa.

Nota: Una masa entre paréntesis indica que esa masa es combinada. Una masa combinada es contigua durante un número de ciclos. Cuando se muestra una masa combinada, indica que se trata de un espectro promedio, que contiene la media de todos los espectros contiguos.

Figura 5-5: Visor IDA



Bases de datos de biblioteca

La función Library Search compara los espectros desconocidos con los espectros de MS conocidos incluidos en la base de datos de biblioteca y genera una lista de posibles coincidencias. Utilice Library Search para crear y gestionar una base de datos de espectros de masas que se puede utilizar para buscar y cotejar espectros desconocidos con los espectros de masas almacenados en la base de datos.

Con Library Search, los usuarios pueden:

- Comparar el contenido de la biblioteca con un espectro desconocido.
- Agregar registros a la biblioteca.
- Editar registros existentes.

Los datos de la biblioteca se pueden guardar en las siguientes ubicaciones:

- MS Access en una base de datos local.
- MS SQL Server.

Antes de poder utilizar la función Library Search, determine dónde se almacena la base de datos de la biblioteca y conecte su ordenador a esa ubicación. Las bases de datos de biblioteca se pueden almacenar localmente en un ordenador o en un servidor a través de una red.

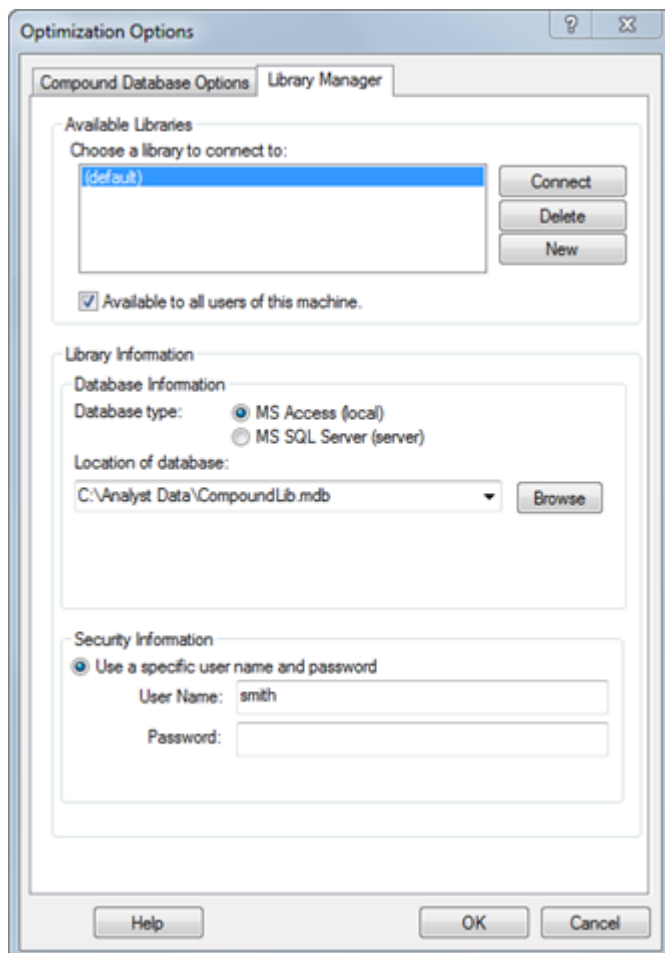
Utilice un alias para conectarse a una base de datos. En este caso, el alias identifica una conexión a una base de datos específica y puede incluir el nombre de usuario y la contraseña necesarios para acceder a la base de datos. Por ejemplo, un usuario podría tener en un ordenador una pequeña base de datos de biblioteca con compuestos identificados, y su empresa podría tener una base de datos central que los usuarios utilizan de vez en cuando. Crear un alias para cada base de datos permite al usuario cambiar entre ellas rápidamente. Para obtener más información acerca de la creación de alias y cómo conectarse a bases de datos, consulte la Ayuda.

Cambio entre bases de datos de biblioteca existentes

Es posible conectarse con cualquier base de datos que tenga alias ya configurados.

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña **Library Manager**.

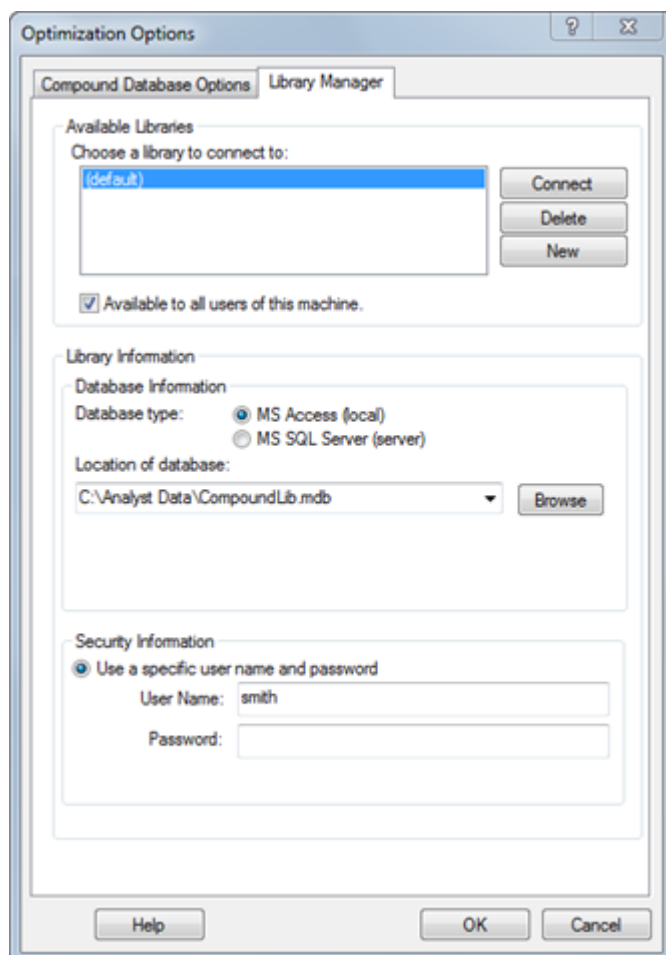
Figura 5-6: Cuadro de diálogo Optimization Options — pestaña Library Manager



3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en el alias de la base de datos a la que desee conectarse y, a continuación, haga clic en **Connect**.
4. (Opcional) Para permitir el acceso de otros usuarios a la base de datos, active la casilla de verificación **Available to all users of this machine**.
5. Haga clic en **OK**.

Crear una base de datos de bibliotecas locales

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña **Library Manager**.

Figura 5-7: Cuadro de diálogo Optimization Options — pestaña Library Manager

3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en **New**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add Library.

Figura 5-8: Cuadro de diálogo Add Library

Add Library

Library Information

Enter a Name for the Library

Database Information

Database type: ☒ MS Access (local) ☐ MS SQL Server (server)

Enter the location of the database:

Browse

Security Information

☒ Use a specific user name and password

User Name:

Password:

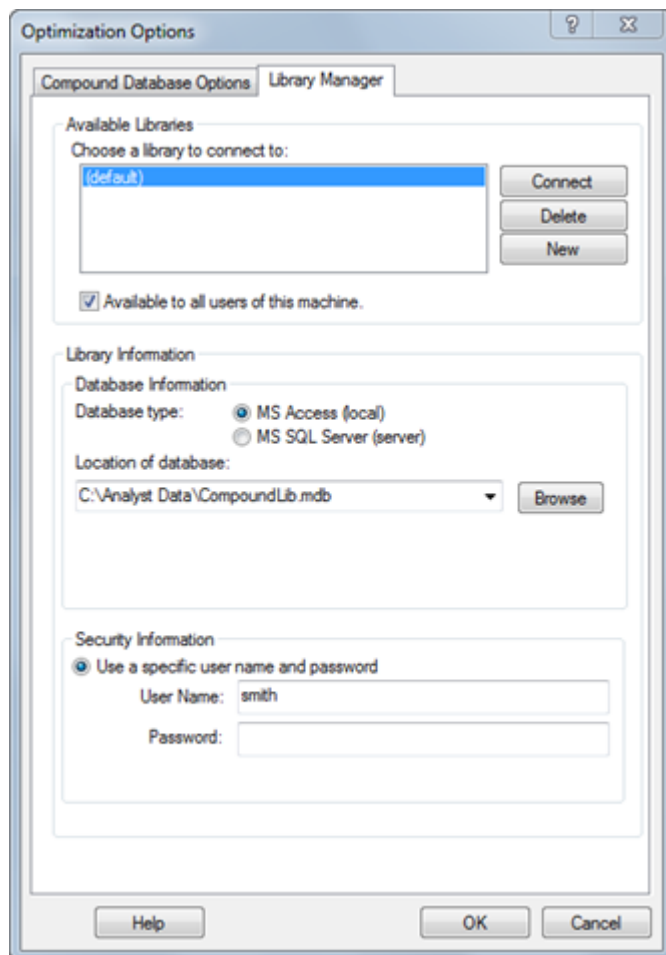
Save Cancel

4. En el campo **Enter a Name for the Library**, escriba un nombre para la biblioteca.
5. En la sección **Database Information**, seleccione **MS Access (local)**.
6. Escriba la ubicación de la base de datos.
7. En la sección **Security Information**, escriba un nombre de usuario y contraseña para acceder a la base de datos, si es necesario.
8. Haga clic en **Save**.

Conexión a una base de datos de biblioteca de servidor

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña **Library Manager**.

Figura 5-9: Cuadro de diálogo Optimization Options; pestaña Library Manager



3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en **New**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add Library.
4. En el campo **Enter a Name for the Library**, escriba un nombre para la biblioteca.
5. En la sección **Database Information**, seleccione **MS SQL Server (server)**.

Figura 5-10: Cuadro de diálogo de añadir biblioteca

The 'Add Library' dialog box is shown with the following fields and options:

- Library Information:** A text input field labeled 'Enter a Name for the Library'.
- Database Information:**
 - Database type: Two radio buttons, 'MS Access (local)' and 'MS SQL Server (server)'. 'MS SQL Server (server)' is selected.
 - Enter the name of the database server: A dropdown menu with a 'Refresh' button to its right.
 - Enter the name of the database on the server: A text input field.
- Security Information:**
 - Use Windows integrated security: A radio button.
 - Use a specific user name and password: A selected radio button.
 - User Name: A text input field.
 - Password: A text input field.
- Buttons:** 'Save' and 'Cancel' buttons at the bottom right.

6. Escriba el nombre del servidor de la base de datos.
7. Escriba el nombre de la base de datos.
8. Realice una de las siguientes acciones:
 - Si es necesario un nombre de usuario y contraseña específicos para acceder a esta base de datos, escriba el nombre de usuario y contraseña.
 - Si se utiliza la seguridad de Windows, en la sección Security Information, seleccione la opción **Use Windows integrated security**.
9. Haga clic en **Save**.

Ver todos los registros de la biblioteca

Haga clic en **Explore > Library Search > List**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Librarian, con todos los registros de la base de datos.

Añadir un registro a la biblioteca

1. Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en **Add a Record**.
El espectro se calcula automáticamente como un centroide. Se abrirá el cuadro de diálogo Add a Record con datos del espectro.

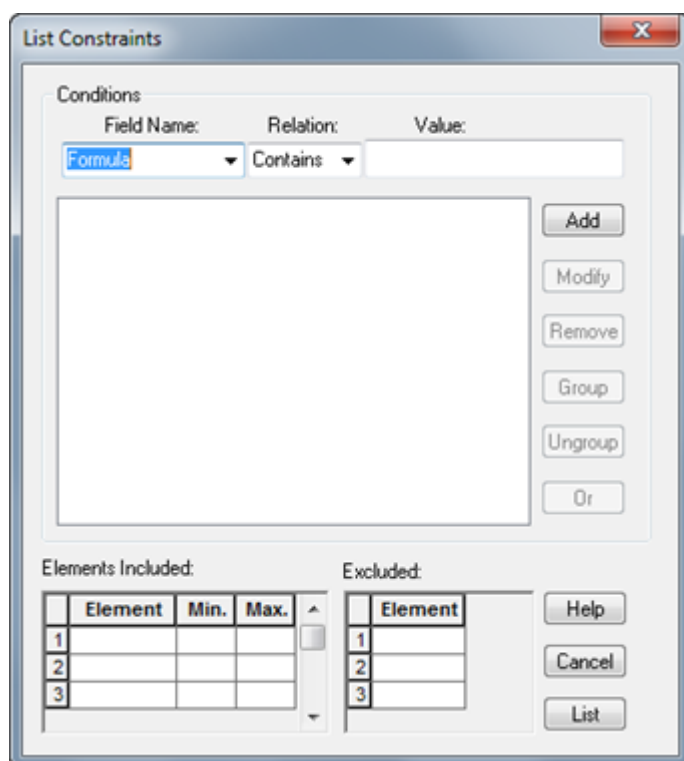
2. En la pestaña Mass Spectral Information, escriba un nombre en el campo **Compound Name**.
El nombre del compuesto es obligatorio y debe identificar de manera exclusiva al compuesto en la biblioteca.
3. Edite el resto de campos. Muchos de los campos se rellenarán automáticamente a partir de los datos asociados al espectro.
4. Haga clic en la pestaña **General Information**.
5. Edite los campos como sea necesario.
6. Haga clic en **OK**.

Búsqueda de registros de la biblioteca con restricciones

Uso de lista con restricciones para refinar resultados. Una vez definidas, las restricciones se utilizan para todas las búsquedas.

1. Haga clic en **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Figura 5-11: Cuadro de diálogo List Constraints



Se abre el cuadro de diálogo List Constraints.

2. En la lista **Field Name**, seleccione el campo sobre el que desee basar la restricción.
3. En la lista **Relation**, seleccione la relación (operador) que se aplica al nombre del campo.
4. En el campo **Value**, escriba el valor del nombre del campo basado en la relación.

Análisis de datos cualitativos

5. Para agregar la restricción seleccionada a la lista **Conditions**, haga clic en **Add**.
6. Siga agregando restricciones a la lista de condiciones según sea necesario.
7. La agrupación de restricciones diferentes en la lista **Conditions** crea condiciones más específicas que mejoran la búsqueda. Para agrupar restricciones, seleccione las restricciones y, a continuación, haga clic en **Group**. Para separar las restricciones agrupadas, haga clic en el grupo y, a continuación, en **Ungroup**.
8. Para cambiar la relación entre las restricciones, haga clic en la relación y, a continuación, haga clic en **And** u **Or**.
9. Para incluir compuestos que contienen un número concreto de átomos de elementos específicos, seleccione o escriba los elementos en la tabla **Elements Included** y, a continuación, escriba un número mínimo y máximo de átomos del elemento.

Nota: Los símbolos de los elementos distinguen entre mayúsculas y minúsculas. Por ejemplo, el hidrógeno es H, no h, y el Sodio es Na, no NA ni na.

10. Para excluir compuestos que contienen elementos concretos, seleccione o escriba los elementos en la tabla **Excluded**.
11. Para buscar los compuestos que se ajusten a los criterios, haga clic en **List**. Los registros que coincidan con todas las restricciones se mostrarán en la tabla **Records**. Se guardarán las restricciones de lista.

Consejos de búsqueda en biblioteca

Para realizar esta acción	Haga esto
Condiciones de agrupación	Seleccione las condiciones que desee agrupar y, a continuación, haga clic en Group . Esta función tiene el mismo comportamiento que los paréntesis en las fórmulas.
Buscar sin usar restricciones	Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en Search Library . Se abrirá el cuadro de diálogo Search Results.

Buscar un espectro similar

El usuario puede buscar en la biblioteca un espectro y la información de compuesto relacionada que coincida con un espectro activo o sea similar a este. Las búsquedas se pueden realizar con o sin restricciones. Cuando el usuario busca con restricciones, solo se muestran en la lista los registros que coincidan con todos los criterios. Los resultados se muestran en una lista clasificada. El primer elemento de la lista es el que se ajusta en mayor medida al espectro activo. Las entradas inferiores de la lista no mantienen una correspondencia tan buena.

Cuanto mayor sea el número de restricciones seleccionadas, más precisa será la lista y menos coincidencias se mostrarán, aunque estas serán las más relevantes. Después de definir un conjunto de restricciones, se aplicarán a todas las búsquedas subsiguientes, a menos que estas se editen. Cuando un usuario realice búsquedas sin restricciones, habrá una lista mucho más amplia de espectros sugeridos, ya que la biblioteca crea coincidencias con los datos del espectro menos específicas.

En la búsqueda solo se utilizan los picos por encima del umbral. Al seleccionar restricciones de búsqueda, el usuario también puede agregar o quitar picos del espectro activo.

Por ejemplo, si el usuario cree que un pico es en realidad un pico de fondo o de ruido, el pico no se debe utilizar para la búsqueda porque generará resultados poco precisos.

1. Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en **Search With Constraints**.
El software calcula el centroide del espectro automáticamente.
2. En el campo **Maximum Number of Match**, indique el número máximo de compuestos que desea que devuelva la búsqueda.

Figura 5-12: Cuadro de diálogo Search Constraints

Constraint	Tolerance	Unit
Mass Tolerance	+/- 0.2	Da
Intensity Factor	+/- 2	
1st Precursor m/z	+/- 0.25	Da
Collision Energy	+/- 5	
2nd Precursor m/z	+/- 0.25	Da
Excitation Energy	+/- 5	
Retention Time	+/- 0.1	min

3. En la sección **Preselect Constraints**, active las casillas de verificación de las restricciones que se desee aplicar.

4. Para cada restricción seleccionada, en la sección **Preset Tolerance**, indique la tolerancia.
5. Si es necesario, seleccione un método de ordenación de registros en la lista **Result Sorted by**.
6. Si es necesario, escriba texto en el campo **Comment Contains**.
7. Si es necesario, escriba texto en el campo **Keyword Contains**.
8. Para aplicar restricciones de picos mediante la adición o eliminación de picos, haga clic en **Peak Constraints**.
Se abrirá la tabla Peaks Included.
9. Para agregar picos a la lista en la que vaya a buscar, haga clic en **Add** y, a continuación, escriba los valores de m/z y la intensidad correspondiente en la celda vacía.
10. Para eliminar picos para que no se incluyan en la búsqueda, seleccione los picos y, a continuación, haga clic en **Remove**.
11. Haga clic en **Search** para guardar las restricciones e iniciar la búsqueda.

Visualización de un compuesto desde los resultados de la búsqueda

Si varios espectros coinciden con el espectro desconocido, el usuario puede ver los espectros conocidos y compararlos con el desconocido.

1. En el cuadro de diálogo Search Results, en la lista de compuestos, seleccione el número de fila del compuesto que desea visualizar.
2. Haga clic en el panel del espectro de uno de los compuestos conocidos.
Se mostrará el espectro del compuesto seleccionado.

Archivos de datos procesados

El usuario puede guardar datos procesados, como disposiciones y etiquetas específicos, que se pueden volver a abrir solo en modo de exploración. Estos archivos también contienen información histórica importante y son parecidos a los archivos de datos, excepto que contienen únicamente los datos del panel activo en Explore. Estos archivos tienen la extensión .pdt y se almacenan en la carpeta Data del proyecto actual.

Guardar un archivo de datos procesados

1. Seleccione el panel de datos que desee guardar.
2. Haga clic en **File > Save Processed Data File**.
3. Escriba un nombre en el campo **File name**.
4. Haga clic en **Save**.

Apertura de un archivo de datos procesados

1. En el modo Explore, haga clic en **File > Open Processed Data File**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Load Processed Data File.
2. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.

Datos cualitativos

El usuario puede ver la información contenida en un archivo de datos en formato de tabla o de gráfico. Los datos gráficos se muestran como cromatograma o como espectro. Los datos de una tabla se muestran como puntos de datos. El usuario puede realizar varias operaciones de clasificación sobre los datos.

Cuando el usuario abre un archivo de datos, se abren diferentes paneles en función del tipo de experimento realizado.

Si está seleccionada la casilla de verificación **MCA** en el editor del método de ajuste, el archivo de datos se abrirá con el espectro de masas (MS). Si la casilla **MCA** no está activada, el archivo de datos se abrirá con el TIC. Seleccione un rango y haga doble clic en el panel de TIC en un punto temporal determinado para mostrar el MS para este rango.

El software almacena los datos en archivos con las extensiones wiff y wiff.scan. Un archivo de datos puede contener datos de más de una muestra. El software necesita tanto los archivos wiff como los wiff.scan para abrir el archivo de datos. Además de los archivos de datos, el software puede abrir archivos txt. Un archivo txt contiene los datos de una única muestra.

Relación señal/ruido

La relación señal/ruido es la altura del pico dividida por el ruido.

Para calcular el ruido, el software utiliza la desviación estándar (utilizando una media de cero) de todos los puntos de datos en el cromatograma desde la hora de **Background Start** hasta la hora de **Background End** (ambas se muestran en los parámetros avanzados de la ventana Peak Review y del editor de método de cuantificación). Estas horas se configuran cuando se define un nuevo rango de fondo.

Si el usuario elabora un método sin definir un nuevo rango de fondo, lo cual es posible si se acepta la integración preestablecida sin cambios, entonces los valores de **Background Start** y **Background End** se muestran como **N/A**. En consecuencia, no se calcula la relación señal/ruido y el campo correspondiente en la tabla de resultados se muestra como **N/A**.

Algoritmos de suavizado

El usuario puede seleccionar el algoritmo de suavizado o el algoritmo de suavizado gaussiano como método de suavizado. La operación de suavizado implica sustituir todos los puntos de datos con una media de los puntos de datos anterior y posterior a él. El conjunto de datos suavizado sustituye al conjunto antiguo.

Los datos se pueden suavizar más de una vez, pero el software solo puede deshacer el último suavizado.

El suavizado no está disponible para los espectros de ion múltiple (MI) o MRM.

Algoritmo de suavización

Al suavizar datos, el usuario define los valores de ponderación de punto para tres puntos de datos: el punto actual, el punto anterior y el punto siguiente. El algoritmo de suavizado multiplica los puntos de datos por los valores de ponderación asignados, suma los valores obtenidos y, a continuación, divide el total por la suma de los valores de ponderación de punto. Este es un suavizado más suave que el aplicado por el algoritmo gaussiano y tarda más tiempo en suavizar datos con mucho ruido.

Algoritmo de suavización gaussiana

La suavización gaussiana implica la sustitución de cada punto de datos por el promedio ponderado de un número de puntos de datos a ambos lados de este. La ponderación de cada nuevo punto de datos se calcula en función de una curva gaussiana. Este es un suavizado menos sofisticado que el del algoritmo de suavizado, pero es un buen método para suavizar datos con mucho ruido.

Defina dos valores cuando utilice el método de suavizado gaussiano:

Gaussian filter width (% of minimal distance between points): la anchura utilizada para calcular la ponderación de puntos cercanos. La anchura se describe en términos de porcentaje de la distancia entre dos puntos del análisis, donde la anchura predefinida de 100 % proporciona una distribución que es tan ancha como la distancia entre los puntos de datos.

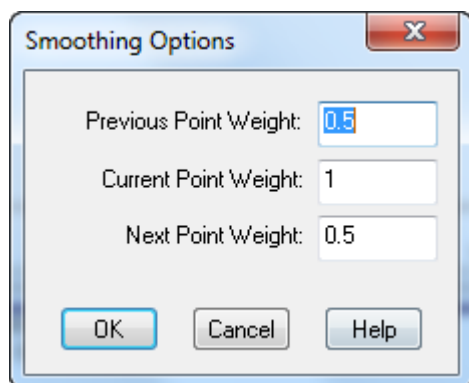
Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points): los límites de la curva gaussiana, mostrada en múltiplos de la distancia entre los puntos. Por ejemplo, el valor predefinido de 10 crea una curva gaussiana que se trunca tras anchuras de diez puntos de datos a ambos lados del punto central.

Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado

Sugerencia: Para deshacer la suavización, haga clic en **Edit > Undo**. El software permite deshacer solo la última suavización.

1. Seleccione un panel que contenga un cromatograma o un espectro.
2. Haga clic en **Explore > Smooth**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Smoothing Options.

Figura 5-13: Cuadro de diálogo Smoothing Options



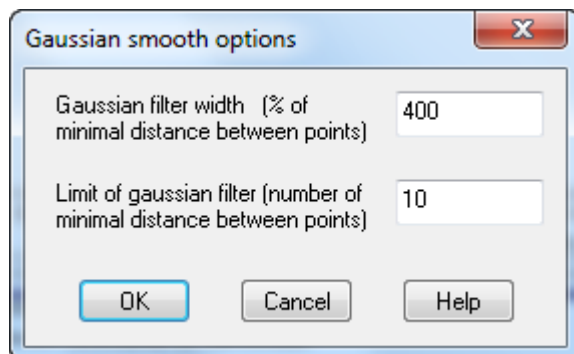
3. En el campo **Previous Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos anterior.
4. En el campo **Current Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos central.
5. En el campo **Next Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos siguiente.
6. Haga clic en **OK**.
El conjunto de datos se suaviza y se sustituye el conjunto de datos actual en el panel.

Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado gaussiano

Sugerencia: Para deshacer el suavizado, haga clic en **Edit > Undo**. El software permite deshacer solo el último suavizado.

1. Seleccione un panel que contenga un cromatograma o un espectro.
2. Haga clic en **Explore > Gaussian Smooth**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Gaussian smooth options.

Figura 5-14: Cuadro de diálogo Gaussian smooth options



3. En el campo **Gaussian filter width**, indique la anchura utilizada para encontrar la ponderación de puntos cercanos como un porcentaje de la distancia entre los dos puntos.
4. En el campo **Limit of gaussian filter**, indique el límite de la curva gaussiana, proporcionado en múltiplos de la distancia entre los puntos.
5. Haga clic en **OK**.
El conjunto de datos se suaviza y se sustituye el conjunto de datos actual en el panel.

Registros del sistema

El registro del sistema contiene informes de eventos del sistema que incluyen errores, advertencias y mensajes. Utilice el visor de eventos de Windows para ver la información que pueda ser útil para resolver problemas y realizar un diagnóstico del sistema. Para utilizar la información del registro de sistema con eficacia, filtre la información para mostrar solo los elementos relativos al software.

Para comprender la información de los registros del sistema y solucionar los errores, consulte el registro de eventos de aplicaciones de Windows. Contiene información relevante para la resolución de problemas.

Guardar el registro del sistema y enviarlo al Soporte

1. Haga clic en **View > Event Log**.
2. Haga clic en el signo más a la derecha de la carpeta **Windows Logs**.
3. Haga clic con el botón derecho del ratón en **Application**.
4. Haga clic en **Save All Events As**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Save As.
5. Escriba el nombre que desee asignar al archivo y, a continuación, haga clic en **Save**.
Se abre el cuadro de diálogo Display Information.
6. Haga clic en **Display information for these languages**.
7. Asegúrese de que **English (United States)** esté seleccionado.
8. Haga clic en **OK**.
9. Adjunte el archivo a un correo electrónico y envíelo a SCIEX.

Nota: Para obtener información sobre funciones adicionales de inicio de sesión para solucionar problemas, comuníquese con sciex.com/request-support.

Filtrar el registro del sistema para obtener información relevante para el software Analyst MD

1. Haga clic en **View > Event Log**.
Se abre el cuadro de diálogo Event Viewer.
2. Haga doble clic en la carpeta **Windows Logs**.

3. Haga clic en **Application**.
4. Haga clic en **Action > Filter Current Log**.
Se abre el cuadro de diálogo Filter Current Log.
5. Seleccione **Analyst** en el campo **Event Sources**.
6. Haga clic en **OK**.
El cuadro de diálogo Event Viewer ahora muestra solamente los eventos filtrados del software Analyst MD.

Opciones de calibración

Las opciones de calibración definen los parámetros de una curva de calibración, que se utilizan para determinar la concentración calculada de las muestras. La curva es un gráfico de la concentración del patrón en relación al área o a la altura del patrón si no se utiliza un patrón interno. Si se usa un patrón interno, la curva es un gráfico de la proporción de concentración con respecto a la proporción del área o de la altura. Esta curva se utiliza, junto con el área (o altura) para las muestras desconocidas, para interpolar la concentración calculada.

Elija el mejor tipo o ajuste de regresión para ajustar la curva a los puntos, y el mejor factor de ponderación para su proyecto.

Acerca de las curvas de calibración

La curva de calibración se utiliza para determinar la concentración calculada de muestras, incluyendo las muestras de control de calidad (QC). Es una curva que se obtiene al representar la concentración del patrón en relación a su área o altura, o proporciones, si se está utilizando un patrón interno. El área o altura de una muestra se aplica entonces a esta curva para determinar la concentración de la muestra, como se ve en la tabla de resultados. La ecuación de regresión generada por esta curva de calibración se utiliza para calcular la concentración de las muestras desconocidas.

El software coloca las concentraciones (o proporciones) conocidas en el eje x y el área o altura (o proporciones) calculada en el eje y. Entonces representa los puntos para todos los patrones del lote. El sistema genera la curva que mejor se ajuste a estos puntos mediante la regresión y el tipo de ponderación seleccionado. La curva se utiliza, junto con el área (o altura), en los desconocidos para interpolar la concentración.

Selección del mejor tipo de regresión

Después de seleccionar un tipo de regresión (ajuste), el usuario no puede ver la curva de calibración del asistente. En su lugar, utilice los valores preestablecidos, su experiencia o la política corporativa para elegir un tipo de regresión.

Después de cambiar el ajuste, compruebe si aparecen cambios en la columna **Accuracy** de la tabla de resultados. Cuanto mejor es el ajuste, mayor será la precisión del análisis cuantitativo.

La curva de calibración representa la concentración de los estándares en relación a su área o altura (o proporciones, si se utiliza un estándar interno) de pico. Cuando se representan los puntos para los estándares, determine el mejor ajuste para que la curva se ajuste mejor a estos puntos e indique su elección en el cuadro de diálogo Specify Calibration del asistente. El ajuste predeterminado es lineal, el cual supone que todos los estándares se encontrarán en una línea recta. Seleccione entre los tipos de ajuste de la siguiente tabla.

Tabla 6-1: Tipos de ajuste

Ajuste	Descripción
Linear	La regresión lineal supone que los puntos del estándar se encuentran en una línea recta.
Lineal a través de cero	La regresión lineal a través de cero supone que los puntos del estándar se encuentran en una línea recta y que los puntos se alinean con el punto cero de los ejes X e Y. Utilice la configuración para forzar que la línea pase por el punto cero.
Cuadrático	Si los puntos del estándar no se encuentran en una línea recta, utilice la regresión cuadrática para generar un ajuste cuadrático a los puntos de datos.
Factor de respuesta promedio	Si los puntos del estándar se encuentran en una línea recta, para promediar los puntos, utilice la regresión del factor de respuesta promedio para generar un promedio de la pendiente para cada punto de la curva.
Potencia	Si en la línea de puntos hay algunas rectas y algunas curvas, utilice la regresión de potencia en vez de la lineal o cuadrática para generar una línea que se encuentre entre estos ajustes.

Seleccione el mejor factor de ponderación

La curva de calibración representa la concentración de los estándares en relación a su área o altura de pico. Cuando se representen los puntos para los estándares, determine el mejor factor de ponderación para estos puntos e indíquelo en el cuadro de diálogo Specify Calibration. El ajuste predeterminado es **None**, que asume que todos los puntos de la curva tienen la misma importancia. Seleccione entre los tipos de ponderación de la siguiente tabla. Para obtener más información, consulte la sección [Factores de ponderación](#).

Tabla 6-2: Tipos de ponderación

Ponderación	Descripción
1/x	Utilice un factor de ponderación de 1/x para colocar un énfasis mayor en los puntos de valor más bajo.
1/x ²	Utilice una ponderación de 1/x ² para colocar un énfasis mucho mayor en los puntos de valor más bajo.
1/y	Utilice un factor de ponderación de 1/y cuando realice una calibración por área (eje y) antes que por concentración (eje x), y haya que colocar énfasis en los puntos de valor más bajo. Una ponderación de 1/y es una variante de 1/x, en la que x e y deben ser proporcionales entre sí.

Tabla 6-2: Tipos de ponderación (continuación)

Ponderación	Descripción
$1/y^2$	Utilice un factor de ponderación de $1/y^2$ cuando realice una calibración por área (eje y) antes que por concentración (eje x), y haya que colocar un énfasis mucho mayor en los puntos de valor más bajo. Una ponderación de $1/y$ al cuadrado es una variante de $1/x$ al cuadrado, en la que x e y deben ser proporcionales entre sí.
$\ln x$	Utilice el logaritmo de x para colocar más énfasis en los puntos de valor más alto.
$\ln y$	Utilice el logaritmo de y para dar más importancia a los puntos de valor más alto. Utilícelo cuando realice una calibración por área (eje y) en lugar de por concentración (eje x).

Algoritmos de integración

El software Analyst MD dispone de dos algoritmos de integración: el algoritmo original Analyst Classic y el algoritmo de integración IntelliQuan. El algoritmo IntelliQuan proporciona una búsqueda de picos más consistente y funcionalidad integrada, con menos parámetros que requieren ajuste.

Algoritmos de integración Analyst Classic e IntelliQuan

El algoritmo IntelliQuan utiliza uno de dos parámetros de búsqueda de picos: Automatic IQA II, que es una configuración sin parámetros, o Specify Parameters MQ III. Después de integrar los picos utilizando el algoritmo IntelliQuan, elija qué parámetro de búsqueda de picos es más adecuado para el conjunto de datos. Esto se hace con los parámetros de integración de picos que se muestran en el panel o ventana Peak Review.

La siguiente tabla muestra los parámetros disponibles con el algoritmo Analyst Classic.

Tabla 6-3: Algoritmo Analyst Classic

Parámetro	Definición
Default Bunching Factor	El número de puntos sobre los que se debe calcular la media en conjunto y que se considera un solo punto con el fin de buscar picos.
Default Number of Smoother	El número de veces que se suaviza el cromatograma.
Default Void Volume Retention Time	Cualquier pico que se produzca antes de este tiempo no se tiene en cuenta.
Default Concentration Units	Las unidades de concentración que se utilizan para describir la concentración de la muestra, por ejemplo, pg/ μ l.

Tabla 6-3: Algoritmo Analyst Classic (continuación)

Parámetro	Definición
Default Calculated Concentration Units	Las unidades de concentración que se utilizan para describir la concentración de la muestra que se ha calculado, por ejemplo, pg/μl.
Default RT Window	La ventana de tiempo centrada sobre el tiempo de retención esperado para la búsqueda de picos. Por ejemplo, una ventana de tiempo de retención de 30 segundos proporciona 15 segundos adicionales antes y después del tiempo de retención esperado.

La siguiente tabla muestra los parámetros disponibles con el algoritmo MQ III, pero no con el algoritmo IQA II.

Tabla 6-4: Algoritmo MQ III

Parámetro	Definición
Default Noise Percentage	El límite que se utiliza para la búsqueda de picos. Solo se detectarán los picos superiores a este porcentaje especificado.
Default Baseline Subtraction Window	Una ventana de tiempo alrededor de cada punto de datos que se utiliza para determinar la altura de la corrección de línea de referencia que se aplica a ese punto. Esta ventana de tiempo ayuda a eliminar el exceso de ruido del cromatograma. La línea de referencia se define como la línea que conecta el punto de intensidad mínima a la izquierda de un punto de datos dado con el punto de intensidad mínima a la derecha, dentro de la ventana especificada.
Default Peak-Splitting Factor	Controla si un agrupamiento de picos dado consta de múltiples picos adyacentes o de un solo pico (posiblemente con ruido). Si la caída de intensidad es menor que el valor especificado, entonces se notifica un solo pico. En caso contrario, el punto de intensidad mínima en la caída divide el agrupamiento en dos picos separados. Configurar un factor elevado evitará que los agrupamientos se dividan en más de un pico.
Default Void Volume Retention Time	Cualquier pico que se produzca antes de este tiempo no se tiene en cuenta.
Report Largest Peak	Al seleccionar este parámetro se obtiene el pico más elevado en la ventana de tiempo de retención. Si este parámetro no se selecciona, se busca el pico más cercano al tiempo de retención esperado. El tiempo de retención esperado se calcula automáticamente en el asistente de cuantificación.

La siguiente tabla muestra los parámetros disponibles para su uso con ambos algoritmos IntelliQuan.

Tabla 6-5: Algoritmo IntelliQuan para IQA II y MQ III

Parámetro	Definición
Default Minimum Peak Height	La altura mínima de un pico requerida para la integración del pico.
Default Minimum Peak Width	La anchura mínima de un pico requerida para la integración del pico.
Default RT Window	Especifica la ventana de tiempo centrada sobre el tiempo de retención esperado para la búsqueda de picos. Por ejemplo, una ventana de tiempo de retención de 30 segundos proporciona 15 segundos adicionales antes y después del tiempo de retención esperado.
Default Smoothing Width	El número de puntos utilizados para el suavizado de los datos.
Default Concentration Units	Las unidades de concentración que se utilizan para describir la concentración de la muestra, por ejemplo, pg/μl.
Default Calculated Concentration Units	Las unidades de concentración que se utilizan para describir la concentración de la muestra que se ha calculado, por ejemplo, pg/μl.

Herramientas de creación de métodos de cuantificación

El software dispone de cuatro herramientas de creación de métodos de cuantificación, cada una de las cuales crea un método totalmente funcional. La mejor opción para la herramienta depende de las tareas que vaya a realizar.

Recomendamos que tan solo creen o modifiquen métodos de adquisición y cuantificación aquellos usuarios que tengan experiencia en el desarrollo de métodos.

Para obtener más información sobre las funciones y la seguridad, consulte la sección *Acerca de las personas y las funciones* en el documento: *Guía del director de laboratorio*.

Asistentes

Los asistentes de creación de métodos disponibles son el asistente Standard Quantitation y el asistente Automatic Quantitation. Ambos permiten al usuario seleccionar el lote o lotes que se desea cuantificar, crear o seleccionar un método de cuantificación, y después integrar los datos de las muestras.

La diferencia entre ellos es el tipo de método creado. El asistente Standard Quantitation crea un método estándar, mientras que el asistente Automatic Quantitation crea un método y automáticamente genera una tabla de resultados. Con el asistente Automatic Quantitation no

se verifican los picos como parte de la creación del método. Sin embargo, aun así se pueden revisar los picos después de realizar la integración.

Existe un solo motivo común por el que no necesitaría verificar los picos: cuando la cuantificación se ha hecho solamente para integrar, no para buscar concentraciones. Puede ser necesario hacer esto, por ejemplo, en un lote que contiene compuestos diferentes en cada muestra, o cuando la masa no es la misma en todas las muestras. Si este es el caso, utilice el asistente automático. En caso contrario, para realizar la cuantificación utilice el asistente Standard Quantitation.

Utilice el asistente de cuantificación estándar después de haber adquirido la muestra, para hacer lo siguiente:

- Elegir una muestra representativa.
- Seleccionar picos del estándar interno y del analito.
- Ajustar los parámetros de búsqueda de picos y de integración.
- Revisar los picos durante la creación del método.
- Seleccionar la calibración.

Utilice el asistente de cuantificación automático para seleccionar un lote, crear un método (sin confirmación de los picos) y después integrar los datos de las muestras. Este asistente es más rápido que el asistente de cuantificación estándar y no requiere que las masas analizadas sean las mismas en todas las muestras. Sin embargo, no permite seleccionar un estándar interno: todos los iones se tratan como analitos.

Utilice el asistente de cuantificación automático después de haber adquirido la muestra en los casos siguientes:

- Quiere seleccionar la calibración.
- No quiere ajustar los parámetros de búsqueda de picos y de integración.
- No quiere seleccionar los nombres de los picos de analitos.
- No quiere ningún estándar interno.
- No quiere revisar los picos durante la creación del método o tiene compuestos distintos en cada muestra.

Cuando solo se están integrando picos, no se necesita verificarlos, ya que no se requiere el cálculo de la concentración. En este caso, utilice el asistente Automatic Quantitation, que permite revisar los picos después de llevar a cabo la integración.

Búsqueda de picos utilizando un método automático

El software utiliza el proceso estándar de detección de picos, con las excepciones siguientes:

- Utiliza el factor de agrupación y el número de suavizados (del asistente) tal cual están.
- Calcula el tiempo de retención esperado y los límites de ruido y área por separado para cada pico.

Editor de método de cuantificación

Utilice esta opción después de haber adquirido la muestra, para hacer lo siguiente:

- Ajustar los parámetros de búsqueda de picos y de integración.
- Seleccionar picos del estándar interno y del analito.
- Seleccionar la calibración.

Utilice el editor del método de cuantificación para realizar tres tareas adicionales:

- Sumar iones para la integración.
- Utilizar un estándar interno de un periodo o experimento distinto (si el estándar interno se adquirió en un periodo o experimento distinto del analito).
- Editar un método existente.

El editor de método semiautomático

El editor de método de cuantificación semiautomático forma parte del editor de lotes.

Utilice el editor de método de cuantificación semiautomático para seleccionar información de la cuantificación, como el tipo de muestra y la concentración de la muestra, antes de la adquisición de datos. Esta preparación facilita la realización de análisis cuantitativos subsiguientes. De forma alternativa, se puede seleccionar un método completo en el editor de lotes, que entonces se aplica automáticamente al final del ciclo de lotes para generar la tabla de resultados de cuantificación.

No utilice el método de cuantificación rápida Quick Quant generado automáticamente para realizar la cuantificación si se utiliza la función de cuantificación rápida para almacenar tipos de muestras y concentraciones en el archivo de datos. Este método de cuantificación no utiliza los parámetros de integración específicos de la muestra y el compuesto optimizados para la selección de picos.

Utilice esta opción en los casos siguientes:

- No ha adquirido ninguna muestra utilizando el mismo método de adquisición.
- Quiere seleccionar los nombres y masas para los picos del estándar interno y del analito.
- Quiere seleccionar concentraciones y tipos de muestras en la pestaña Quantitation del editor de lotes, pero no dispone de ningún otro método de cuantificación.
- Quiere editar más adelante el método de cuantificación, en caso necesario.

Búsqueda de picos utilizando un método semiautomático

El software utiliza el proceso estándar de detección de picos, con las siguientes excepciones:

- Utiliza el factor de agrupación (del cuadro de diálogo Quantitation Method Options) y el número de suavizados (del cuadro de diálogo Create Semi-Automatic Quantitation Method) tal cual están.

- Utiliza el patrón más concentrado como muestra representativa. Para establecer un tiempo de retención, utiliza el pico más elevado dentro del cromatograma en cuestión.
- Para establecer los límites de ruido y área, utiliza el ruido de línea de referencia resultante. (Este proceso es idéntico a la forma de establecer los valores preconfigurados para los picos en los métodos normales). Estos parámetros de integración se aplican a todas las demás muestras.
- Si el lote que se está examinando no contiene información de cuantificación (tipo de muestra y concentraciones), el tiempo de retención y los límites se calculan por separado para cada pico (como en métodos completamente automáticos).

Gráficos de métricas.

Un gráfico de métrica muestra gráficamente los datos de una columna de la tabla de resultados representados en función del eje X o el eje Y, o los datos de dos columnas representadas la una con respecto a la otra. En esta sección se describe cómo generar gráficos de métricas y cómo trabajar con ellos.

El software incluye algunos gráficos de métrica predefinidos:

- Int_Std_Response (para localizar una muestra problemática)
- Analyte_Area versus Height (para verificar el comportamiento de la cromatografía)
- PK profile (conc. frente a punto de tiempo; para ejecutar tras una consulta de muestra)

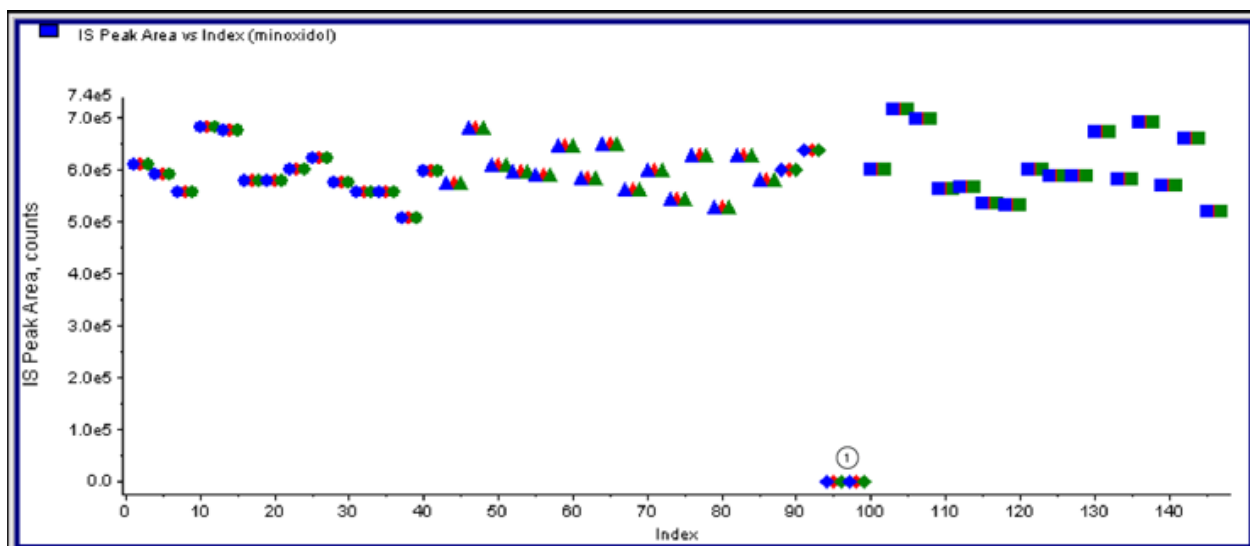
Utilice los gráficos de métrica para representar una columna determinada de la tabla de resultados, como **Analyte Peak Area**, **Accuracy** o **Calculated Concentration**. También se pueden representar dos campos de la tabla de resultados el uno con respecto al otro. Entonces se pueden investigar los puntos que aparecen fuera del intervalo normal. Los gráficos de métrica se utilizan a menudo con consultas. Para obtener más información sobre las consultas, consulte la *Ayuda*.

Genere gráficos de métrica mediante los siguientes métodos:

- Utilice el botón **Plot** para representar una o varias columnas de la tabla de resultados actual, aunque sin guardar los criterios de representación.
- Cree un gráfico específico de tabla para guardar los criterios de representación con la tabla actual.
- Cree un gráfico global para guardar los criterios de representación para su uso con tablas de resultados futuras.

No se podrán ver QC, muestras desconocidas, blancos, blancos dobles ni disolventes en la curva de calibración, pero sí se podrán generar gráficos de métrica a partir de ellos.

Figura 6-1: Ejemplo de un gráfico de métrica para el área del pico de un patrón interno representada en relación con el índice de la muestra



Elemento	Descripción
1	Blancos dobles

Generación de un gráfico temporal de métricas

- Con una tabla de resultados abierta, realice una de las siguientes acciones:
 - Para representar los datos en el eje Y con el eje X como índice, haga clic en el encabezado de la columna de los datos que se van a representar.
 - Para representar los datos de la primera columna seleccionada en el eje X y los de la segunda columna seleccionada en el eje Y, seleccione dos columnas pulsando la tecla Ctrl mientras hace clic en los encabezados de columna.
- Sobre la tabla de resultados, haga clic en el icono **Metric Plot by Selection**. Se abrirá el gráfico de métricas.
- Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en Data Legend para ver una explicación de los colores utilizados en el gráfico.
- Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en Point Legend para ver una explicación de los símbolos utilizados en el gráfico.

Generar un gráfico de métrica y guardar los criterios de representación

- Abra una tabla de resultados adecuada.
- Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Metric Plot > New**.

Figura 6-2: Cuadro de diálogo Metric Plot

Metric Plot

Name:

Save/Execute

Cancel

Execute

Help

X Axis

Group: Index

Column:

Y Axis

Group: Index

Column:

Show

Regression: None

Weighting: None

☒ None

☐ Percent Deviation

Percent: 50

☐ Standard Deviation

Multiplier: 2

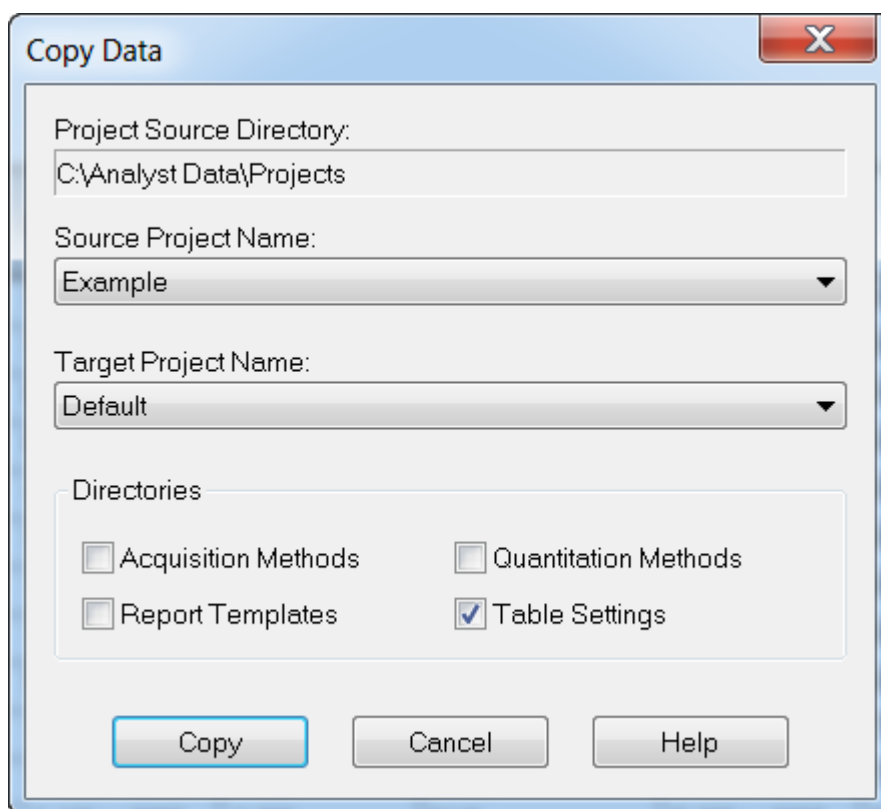
3. En el campo **Name**, escriba el nombre de los nuevos criterios de representación.
4. En el grupo X-Axis, en la lista **Group**, seleccione **Index** y luego deje la lista **Column** en blanco para trazar un campo en el eje Y utilizando el eje X como índice.
5. Si es necesario, en el grupo Y-axis, en la lista **Group**, seleccione **Internal Standard**, y luego, en la lista **Column**, seleccione **IS Peak Area** para trazar dos columnas una contra la otra.
6. Si es necesario, en la lista **Regression**, seleccione el tipo de regresión que desee utilizar y, a continuación, seleccione la configuración de regresión adecuada.
7. Para generar el gráfico y guardar los criterios de representación, haga clic en **Save/Execute**.
Se abrirá el gráfico de métricas. Para obtener más información, consulte la figura [Figura 6-1](#).
8. Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Data Legend** para ver una explicación de los colores utilizados en el gráfico.
9. Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Point Legend** para ver una explicación de los símbolos utilizados en el gráfico.
Este conjunto de criterios está ahora disponible para futuros gráficos de esta tabla de resultados. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados para acceder a los criterios. Los criterios del gráfico también se pueden editar.

10. Para ver la muestra problemática, intente representar la concentración de la muestra desconocida con respecto al tiempo o representar el área del estándar interno con respecto al índice.

Almacenamiento de criterios de representación predeterminados para futuras tablas de resultados

1. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y luego haga clic en **Table Settings > Export To New Table Settings**.
De esta forma se exportará la configuración de la tabla del rdb para que pueda utilizarse en otros procesamientos de cuantificación dentro del proyecto.
2. Para exportar la configuración de la tabla a otro proyecto, haga clic en **Tools > Project > Copy Data**.

Figura 6-3: Cuadro de diálogo Copy Data



Parámetros de límite de ruido y área

Para identificar los picos, el software requiere un conjunto de parámetros de límite de ruido y área. El software establece inicialmente estos parámetros, pero los usuarios pueden cambiarlos más adelante. El software establece los parámetros de la siguiente manera:

1. El software calcula la diferencia de intensidad más elevada entre dos puntos de datos secuenciales cualquiera. Este número representa la diferencia entre dos intensidades, no la intensidad real en sí.

2. Para cada par secuencial con una diferencia de intensidad menor del 5% del valor calculado en el paso 1, calcula la desviación estándar (utilizando una media de cero) de las diferencias de intensidad. El software no utiliza aquellos pares de puntos cuya diferencia de intensidad sea mayor del 5 % del máximo.
 - El límite de ruido es igual a la desviación estándar calculada en el paso 2.
 - El límite de área es igual a cinco veces el límite de ruido.

Nota: El valor mínimo para el límite tanto de ruido como de área es 0,000001. Si los cálculos precedentes obtienen un valor menor que este mínimo, entonces el software restablece el valor de este límite a 0,000001.

Recalcular el límite de ruido y área

Si se define una nueva área de fondo, el software vuelve a calcular los límites de ruido y área de la forma siguiente.

Para cada par secuencial de puntos de datos, el software calcula la desviación estándar de la diferencia de intensidad, utilizando una media de cero. El software Analyst MD utiliza todos los puntos dentro del intervalo seleccionado porque se le indica explícitamente que el área seleccionada es ruido de fondo.

- El límite de ruido es igual a la desviación estándar calculada del intervalo seleccionado.
- El límite de área es igual a cinco veces el límite de ruido.

Nota: El valor mínimo para el límite tanto de ruido como de área es 0,000001. Si los cálculos precedentes obtienen un valor menor que este mínimo, entonces el software restablece el valor de este límite a 0,000001.

Integración de picos

Los siguientes son tipos de integración según los cuales se ha buscado e integrado la línea de referencia cuando se ha encontrado un pico.

- **Manual:** el usuario ha integrado el pico manualmente.
- **Automatic:** el pico se ha integrado automáticamente como sigue:
 - **Baseline-to-baseline:** el área del pico se define mediante líneas descendentes verticales al principio y al final del pico, que se extienden hasta la línea de referencia. Este tipo de integración solamente es posible para picos que carecen de otro pico que les preceda o siga inmediatamente.
 - **Valley:** igual que Baseline-to-baseline, excepto que solo se aplica a los picos que tienen otro pico que les precede o sigue inmediatamente.
 - **Exponential Skim:** el área del pico es el pico principal o primario en una separación exponencial.
 - **Exponential Child:** el área del pico es el pico secundario resultante de una separación exponencial.

Revisión de picos

Durante la revisión de picos los usuarios pueden estudiar los picos que el software ha seleccionado y, a continuación, redefinir el pico o los puntos de inicio y fin cuando sea necesario.

Por lo general, el software es capaz de identificar con exactitud los picos del estándar interno y del analito. Por varias razones, la definición del método de cuantificación y de adquisición de muestras entre otras, el software omite a veces el pico correcto, escoge el incorrecto o no es capaz de localizar un pico. Otras veces, aunque puede que el software identifique correctamente el pico, los usuarios podrían no estar de acuerdo con los puntos de inicio y fin seleccionados.

Consejos para la revisión de picos

Para realizar esta acción	Haga esto
Integración de picos: para revisar picos	<p>Para revisar todos los picos, asegúrese de que se muestran todas las muestras en la tabla de resultados.</p> <p>La ventana Peak Review contiene los picos enumerados en la tabla de resultados. Si se ocultan algunas muestras en la tabla (por ejemplo, si ha aplicado una consulta), estas tampoco aparecerán en la revisión de picos.</p>
Integración de picos: para desplazarse al primer pico del lote	<p>Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar del panel Peak Review y, a continuación, haga clic en Show First Page. Para desplazarse al último pico del lote, haga clic con el botón derecho en cualquier lugar del panel Peak Review y, a continuación, haga clic en Show Last Page.</p>

Detección de picos

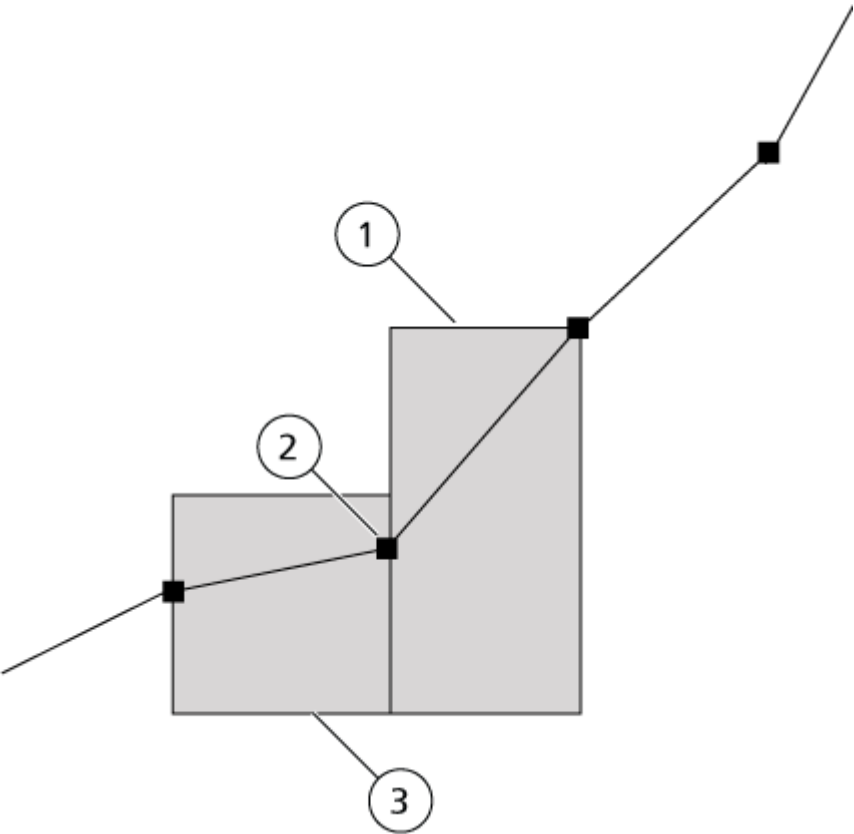
El software detecta los picos en cuatro fases.

1. Busca el inicio potencial del pico examinando la distancia entre cada punto agrupado y el precedente. Cuando la distancia supera el límite actual de ruido, se ha encontrado un inicio potencial del pico.
2. Confirma el inicio del pico asegurándose de que existen suficientes puntos en línea para superar el límite de área.
3. Determina el ápice del pico buscando un punto más bajo que el punto anterior.
4. Determina el final del pico identificando el lugar en el que la distancia entre un punto agrupado y el siguiente cae por debajo del límite de ruido. En caso necesario, separa los picos.

Búsqueda del inicio potencial del pico

Para encontrar el inicio potencial del pico, el software mide la diferencia de intensidad entre pares secuenciales de puntos agrupados, empezando por el primer punto. Cuando encuentra una diferencia que supera el límite actual de ruido, el software establece que el primer punto es un inicio potencial del pico.

Figura 6-4: Búsqueda del inicio potencial del pico



Elemento	Descripción
1	Supera el límite de ruido
2	Inicio potencial del pico
3	No supera el límite de ruido

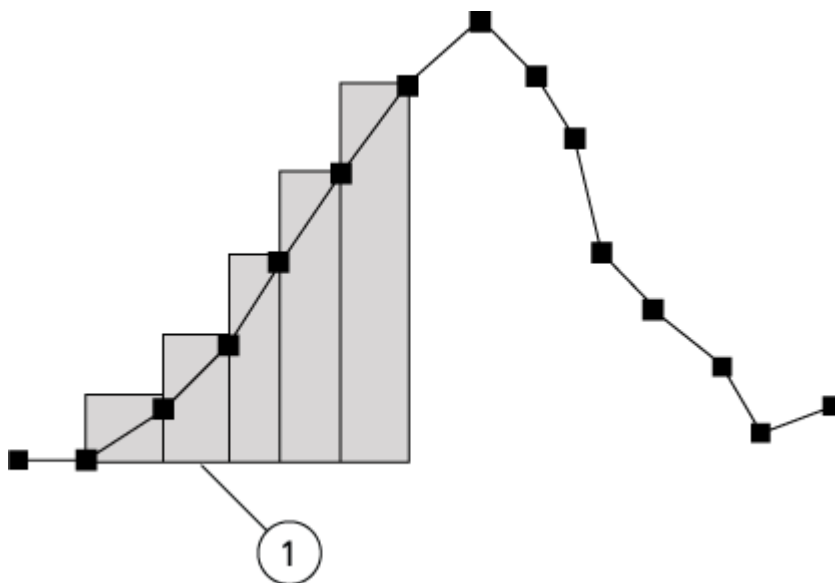
Confirmar el inicio del pico

Para asegurarse de que ha encontrado un pico real, el software recorre la curva, añadiendo a una suma total la diferencia de intensidad entre cada punto de datos agrupado y la intensidad en el inicio potencial del pico. Este proceso se detiene cuando la diferencia de intensidad entre puntos sucesivos es menor que el límite de ruido. Esta suma es una aproximación del área del borde anterior del pico. Si esta suma supera el límite de área, entonces el software confirma el inicio del pico.

Análisis de datos cuantitativos

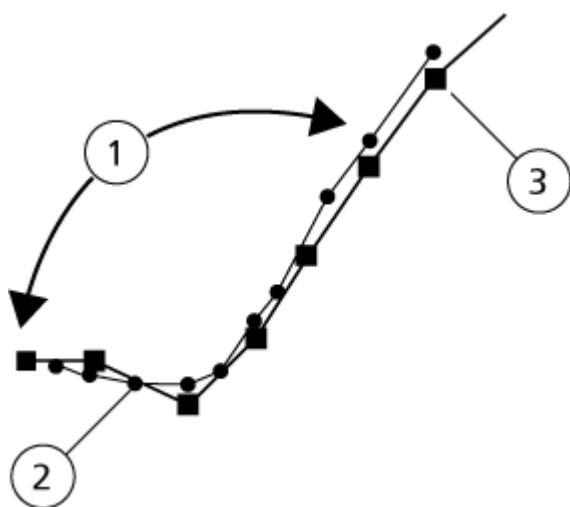
A continuación, el software determina el inicio real del pico moviéndose hacia atrás desde el inicio potencial del pico, hasta que encuentra el punto más bajo del pico. Se mueve hacia atrás a través de cinco agrupaciones de datos sin procesar. Este punto es el inicio del pico real.

Figura 6-5: Confirmación del inicio del pico



Elemento	Descripción
1	Suma de porciones de área mayor que el límite del área

Figura 6-6: Confirmar el inicio del pico real



Elemento	Descripción
1	Revisar los puntos de datos en esta región

Elemento	Descripción
2	Punto de datos mínimo
3	Inicio potencial del pico

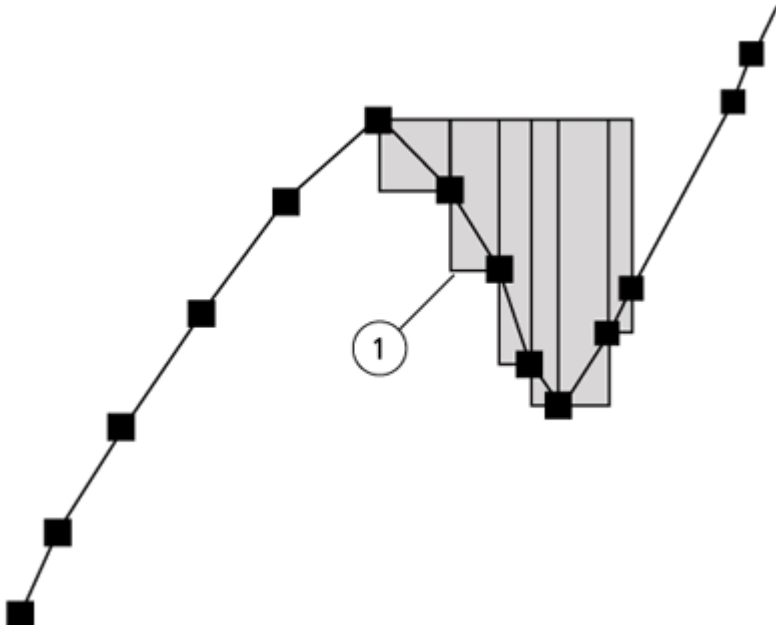
Búsqueda del ápice del pico

Para encontrar el ápice del pico, el software primero busca un punto que es menor que el punto precedente. Entonces, para confirmar que ha encontrado correctamente el ápice, suma las diferencias de intensidad entre el ápice potencial y los puntos agrupados subsiguientes hasta que alcanza el final del pico. Si la distancia total entre dos puntos supera dos tercios del límite de área, entonces se confirma el ápice del pico. Es decir, el software se asegura primero de que tenga un pico, y luego trabaja hacia atrás para encontrar su ápice.

Sin embargo, si el software encuentra un punto agrupado más alto antes de pasar la prueba del área, entonces identifica un ápice nuevo y vuelve a iniciar la prueba del área.

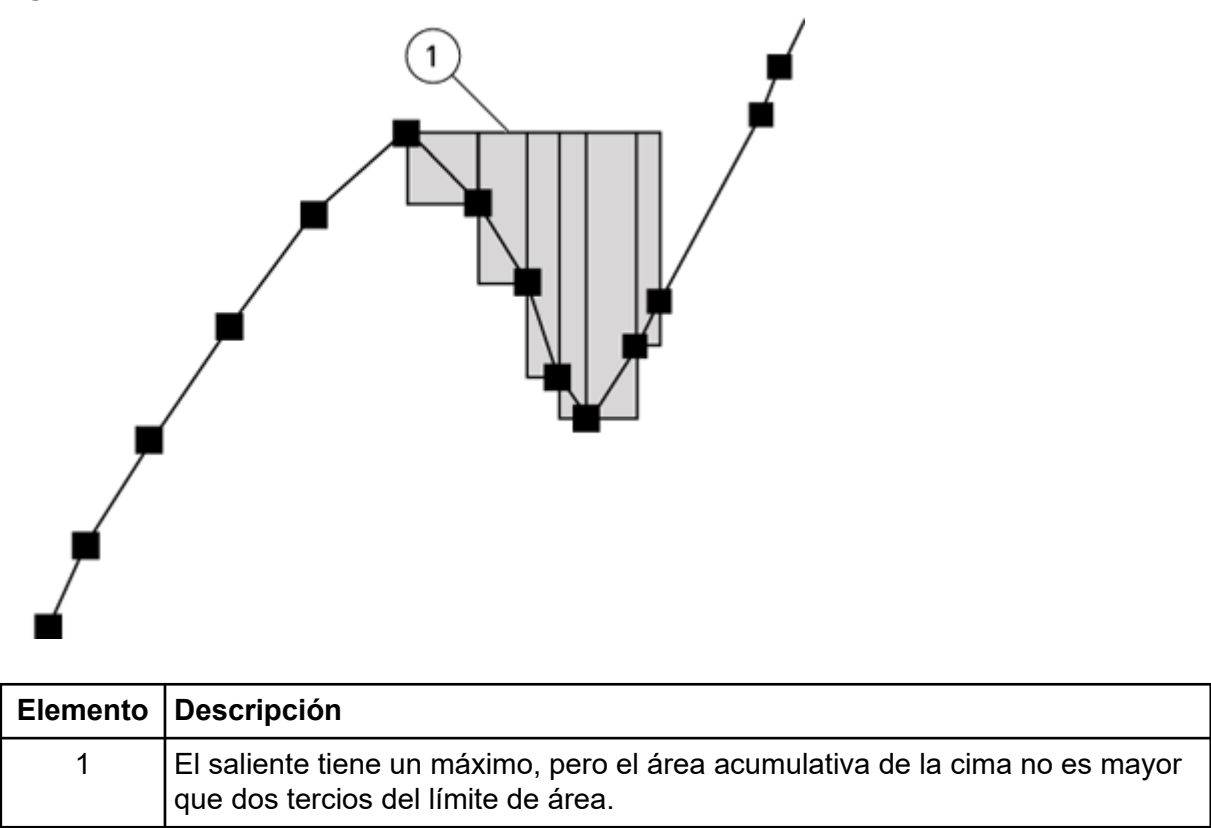
Nota: El tiempo de retención real de un pico no es simplemente el punto identificado como se ha descrito anteriormente. En su lugar, se determina a partir de un ajuste cuadrático basado en los tres puntos de datos más altos.

Figura 6-7: Búsqueda del ápice del pico



Elemento	Descripción
1	La suma de porciones de área es mayor que dos tercios del límite de área

Figura 6-8: Identificar un nuevo ápice del pico



Búsqueda del final del pico

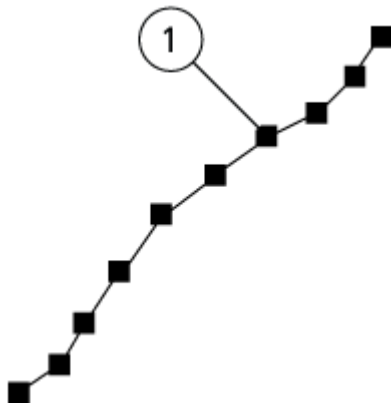
El software determina un punto final de un pico cuando se produce uno de los siguientes casos:

- La diferencia entre dos puntos consecutivos no supera la prueba de límite de ruido.
- El software detecta el inicio de un nuevo pico.

En ambos casos, el punto agrupado más bajo de los últimos cinco agrupamientos se considera el punto final real del pico.

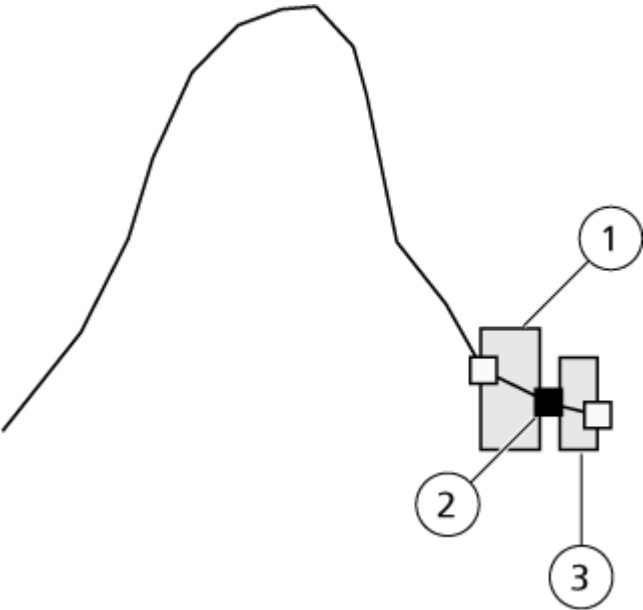
El software suele encontrar varios picos para cada cromatograma. El pico que selecciona es aquel cuyo tiempo de retención se acerque más al tiempo de retención esperado, especificado en el método. Si el tiempo de retención del pico no se encuentra dentro de las especificaciones, el software marca el pico como no encontrado.

Figura 6-9: Búsqueda de picos



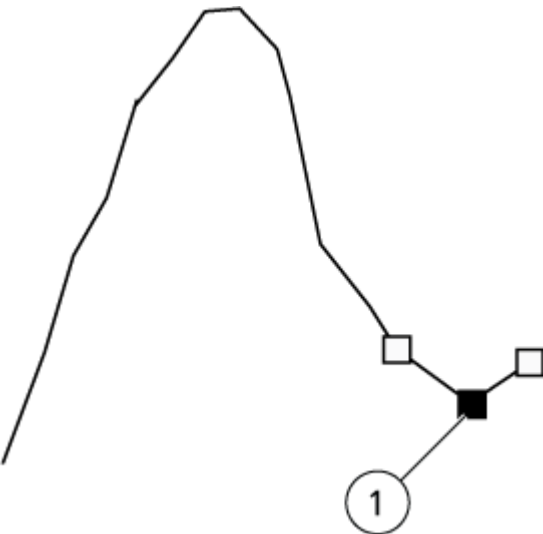
Elemento	Descripción
1	El saliente no tiene un punto máximo separado

Figura 6-10: Buscar el final del pico: caso 1



Elemento	Descripción
1	Supera el límite de ruido
2	Final del pico
3	No supera el límite de ruido

Figura 6-11: Buscar el final del pico: caso 2



Elemento	Descripción
1	Final del pico

Dividir picos

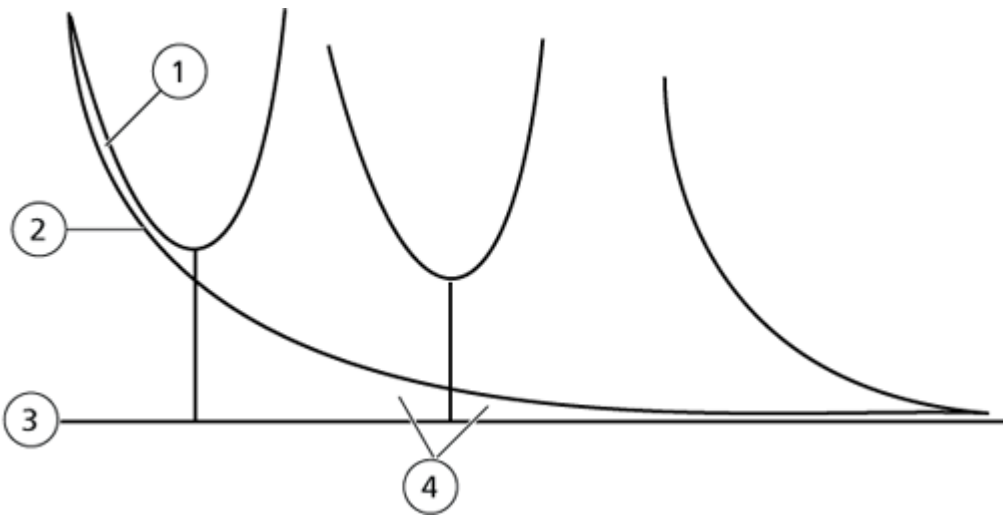
Si comienza un pico nuevo antes de que el pico actual alcance la línea de referencia, el software decide, basándose en los criterios siguientes, si resolver la línea de referencia utilizando separaciones exponenciales. La separación pasa por debajo de uno o más picos que siguen al precursor. Estos picos se denominan picos producto.

Cuando el software realiza una separación exponencial, sustrae de los picos producto el área por debajo de la separación y se la pone al pico precursor. Entonces sustrae del pico precursor el área pequeña por encima de la separación y la añade al primer pico producto.

El software aplica los siguientes criterios para determinar si utilizará la separación exponencial:

- Proporción de picos exponencial
- Proporción ajustada exponencial
- Proporción de valle exponencial

Figura 6-12: Dividir picos: una separación exponencial



Elemento	Descripción
1	Esta área se sustrae del pico precursor y se añade al primer pico producto
2	Separación exponencial
3	Línea de referencia de agrupamiento
4	Estas áreas se sustraen de los picos producto y se añaden a los picos precursores

Consultas

Una consulta es un método para seleccionar únicamente los registros que cumplen determinados criterios. Los usuarios pueden utilizar consultas para visualizar partes específicas de los datos que les interesen de la tabla de resultados, a partir de selecciones de texto o matemáticas. Una consulta guardada en un proyecto está disponible para todas las tablas de resultados dentro de ese proyecto.

Cuando se utiliza una consulta, la tabla muestra solamente las filas de datos que cumplen los criterios seleccionados. Se muestran todas las columnas. Se pueden afinar más las selecciones ejecutando una segunda consulta para las filas que se obtienen tras la primera consulta.

Utilice selecciones predefinidas e introduzca criterios manualmente para crear una consulta que se pueda ejecutar, guardar o modificar. Cada línea de la consulta funciona como una búsqueda booleana que se ejecuta sobre las columnas de la tabla de resultados para determinar qué registros se muestran. Cada línea de la consulta selecciona los registros que cumplan sus criterios para mostrarlos. Se pueden definir consultas preconfiguradas o específicas de una tabla.

Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos en una tabla de resultados.

Consultas sobre el tipo de muestra

Para una consulta diseñada para seleccionar solo el tipo de muestra estándar, la tabla de resultados muestra solo aquellas filas de datos que contengan «Standard» en la columna Sample Type.

Consultas predeterminadas y consultas específicas de la tabla

Una consulta predeterminada por lo general se utiliza para identificar las muestras que no cumplan ciertos criterios. Una consulta específica de la tabla por lo general se utiliza para identificar los registros que cumplan ciertos criterios.

La consulta predeterminada por lo general se utiliza para buscar problemas con el control de calidad o los patrones. Si se selecciona la concentración y variación máxima de los controles de calidad y patrones en el asistente de métodos de cuantificación, entonces la tabla de resultados muestra solo aquellas muestras que se encuentren fuera de este intervalo. Si la tabla de resultados no muestra nada, entonces las muestras son satisfactorias. Si se ha seleccionado la casilla de verificación Execute Query as Standard Query, se visualizan todas las muestras de la tabla de resultados, pero aparece un estado de correcto o incorrecto en la columna Standard Query Status, en función de si las muestras pasaron o no la consulta.

Las consultas específicas de la tabla se ejecutan sobre una tabla de resultados que se visualiza, para seleccionar aquellos registros que cumplan ciertos criterios. Diseñe estas consultas mediante el menú que está disponible al hacer clic con el botón derecho en la tabla. Guarde y exporte una consulta para que esté disponible para tablas de resultados futuras.

Configuración específica de la tabla o global

Cuando se trabaja con las opciones de configuración de la tabla, los procedimientos pueden ser específicos de la tabla o globales.

- **Table-specific settings:** cuando se modifica la configuración de la tabla sobre la tabla misma, los cambios de configuración estarán disponibles solo para esta tabla. Sin embargo, se pueden exportar como una configuración global.
- **Global settings:** cuando se modifica la configuración global, se está cambiando un grupo de ajustes que pueden aplicarse a tablas de resultados futuras. Para personalizar una tabla de resultados que se está creando, elija un grupo de ajustes en la página Create Quantitation Set: Select Settings & Query. Si no se selecciona un grupo de ajustes, el software utiliza automáticamente la configuración predeterminada.

Cómo afectan a los resultados las variaciones en precisión

Para las consultas predeterminadas, la precisión se expresa como un porcentaje y se implementa como más o menos ese número. Por ejemplo, si en el cuadro de diálogo Create Default Query introduce 10 como **Maximum Variation for standards**, entonces se muestran en la tabla de resultados todos los registros que contengan patrones cuya precisión se encuentre fuera del 90 % y 110 %. Si se introduce 5, se mostrarían en la tabla de resultados solo aquellos patrones cuya precisión fuera menor del 95 % y mayor del 105 %. Consulte la sección [Tablas de resultados](#).

Ecuaciones de regresión

Esta sección describe las ecuaciones utilizadas para calcular las curvas de regresión. En las siguientes ecuaciones, x representa la concentración del analito para muestras Standard (Patrón), y representa el área o la altura del pico correspondiente. Las variables exactas utilizadas para la regresión dependen de si se está utilizando un patrón interno y de si el área o la altura del pico se utiliza como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 6-6: Variables de regresión

¿Se ha utilizado patrón interno?	¿Se ha utilizado el área?	x	y
Sí	Sí	$C_a / C_{es} / DF$	A_a / A_{es}
Sí	No	$C_a / C_{es} / DF$	H_a / H_{es}
No	Sí	C_a / DF	A_a
No	No	C_a / DF	H_a

donde:

- C_a = concentración real del analito
- C_{es} = concentración del patrón interno
- DF = factor de dilución

- A_a = área de pico de analito
- A_{es} = área de pico del patrón interno
- H_a = altura de pico de analito
- H_{es} = altura de pico del patrón interno

Opciones de ajuste

El ajuste indica el tipo de análisis de regresión a aplicar en los datos. Las distintas opciones de ajuste son lineal, lineal a través de cero, factor de respuesta promedio, potencia y cuadrática.

Regresión lineal

La regresión lineal supone que los puntos del estándar se encuentran en una línea recta.

La ecuación de calibración lineal es la siguiente:

$$y = mx + b$$

La pendiente y la intersección se calculan así:

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

donde:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

Lineal a través de cero

La regresión lineal a través de cero supone que los puntos del estándar se encuentran en una línea recta y que los puntos se alinean con el punto cero de los ejes x e y. Utilice la configuración para forzar que la línea pase por el punto cero.

La ecuación de calibración lineal a cero es la siguiente:

$$y = mx$$

La pendiente se calcula así:

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

Factor de respuesta promedio

La calibración del factor de respuesta promedio es:

$$y = mx$$

Esta es la misma ecuación que la de calibración lineal a través de cero. Sin embargo, la pendiente se calcula de forma diferente:

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

y la desviación estándar del factor de respuesta como:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

donde:

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

Nota: Los puntos cuyo valor x es cero se excluyen de las sumas.

Si en la línea de puntos hay algunas rectas y algunas curvas, utilice la regresión de potencia en vez de la lineal o cuadrática para generar una línea que se encuentre entre estos ajustes.

Potencia

La ecuación de calibración de la función de potencia es:

$$y = ax^p$$

Las ecuaciones para la calibración lineal se utilizan como se ha descrito anteriormente para calcular la pendiente (m) y la intersección (b), excepto que en estas ecuaciones x se sustituye por ln x e y se sustituye por ln y. Una vez hecho esto, a y p se calculan así:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Si alguno de los valores de x o y son negativos o cero, se notifica un error.

Cuadrática

La ecuación de calibración cuadrática es la siguiente:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Los coeficientes polinomiales se calculan así:

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^2) / \sum w$$

donde:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

Factores de ponderación

La siguiente tabla muestra cómo se calcula el factor de ponderación (w) para cada uno de los siete tipos de ponderación.

Tabla 6-7: Factores de ponderación

Tipo de ponderación	Ponderación (w)
Ninguna	Siempre 1,0.
1/x	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^5$. De lo contrario, $w = 1 / x $.
1 / x ²	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^{10}$. De lo contrario, $w = 1 / x^2$.
1 / y	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^8$. De lo contrario, $w = 1 / y $.
1 / y ²	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^{16}$. De lo contrario, $w = 1 / y^2$.
ln(x)	Si $x < 0$, entonces se genera un error. Si $x < 10^{-5}$ entonces $w = \ln 10^5$. De lo contrario, $w = \ln (x) $.
ln(y)	Si $y < 0$, entonces se genera un error. Si $y < 10^{-8}$ entonces $w = \ln 10^8$. De lo contrario, $w = \ln (y) $.

Plantillas de informes

Esta sección describe los diferentes elementos que se utilizan en las plantillas de informe que se crean con el **Report Template Editor** en la sección **Configure** de la barra de navegación del software Analyst MD.

Se puede añadir la información siguiente a los encabezados y pies de página de los informes.

Nota: Realice una copia de seguridad de las plantillas de informes existentes antes de editarlas.

Tabla 6-8: Elementos básicos del diseño

Elemento	Definición
Printing Date	(Fecha de impresión) Fecha en la que se imprimió el documento.
Printing Time	(Hora de impresión) Hora en la que se imprimió el documento.
Operator	(Operador) El operador que imprimió el documento.
Workstation	(Estación de trabajo) La estación de trabajo desde la cual se imprimió el documento.
Page n of N	(Página n de N) Número de página del total de páginas.
Custom Field	(Campo personalizado) Cree aquí un texto personalizado.
Analyst Version	(Versión de Analyst) Versión del software Analyst MD.
User Type	(Tipo de usuario) Tipo de usuario (seguridad).
Electronic Signature	(Firma electrónica) Indica si la función de firma electrónica (seguridad) está habilitada o deshabilitada.

Tabla 6-9: Elementos de la adquisición

Elemento	Definición
Acquisition File	El nombre del fichero de datos que contiene la información de la adquisición de la muestra.
Acquisition Date	Fecha de adquisición de la muestra.
Acquisition Time	Hora de adquisición de la muestra.
Operator	Nombre del operador que ejecutó el lote de muestras.
Batch Name	Nombre del lote.
Sample Number	Número relacionado con la muestra.
Sample Name	Nombre de la muestra.
Sample Comment	Comentario sobre la muestra introducido mediante Acquisition Method Editor.
Sample ID	Número de identificación de la muestra.
Scan Mode	El método con el cual el sistema calcula los puntos de masa para un análisis del intervalo completo de la masa.

Tabla 6-9: Elementos de la adquisición (continuación)

Elemento	Definición
Scan Type and Polarity	El tipo de análisis de adquisición (Q1, Q3, MRM, ion producto, ion precursor, pérdida/ganancia neutra) y la polaridad del método de adquisición (positiva o negativa).
Scan Mass(es)	Iones o fragmentos de iones que se analizarán.
Dwell Time	El tiempo que tarda el sistema en analizar una masa específica.
Pause Time	Una pausa entre el análisis de intervalos de masa o entre experimentos.
Ion Energy	La energía de iones se deriva del método de adquisición y está relacionada con la energía de colisión o el voltaje de la fuente de iones IonSpray.
Collision Energy	La energía de colisión se deriva del método de adquisición y está relacionada con el voltaje de la fuente de iones IonSpray.
Period and Experiment	Un periodo consta de una serie de experimentos. Un experimento contiene una serie de propiedades como Scan Type, Scan Mode, Resolution, Ion Source Parameters y una variedad de rangos de masa o masas.
State Table Parameters	Los parámetros del espectrómetro de masas utilizados en el experimento.
Bomba	Nombre de la bomba utilizada en el experimento.
Procesador de muestras automático	Nombre del procesador de muestras automático utilizado en el experimento.
Custom Annotation	Texto personalizado añadido en el editor de lotes.
Collected By	Nombre de la persona que ha recopilado los datos.

Tabla 6-10: Elementos de la cuantificación

Elemento	Definición
Results Table Name	Nombre de la tabla de resultados.
Results Table Path	Ubicación de la tabla de resultados.
Method Name	Nombre del método de cuantificación.
Method Path	Ubicación del archivo de método.

Tabla 6-10: Elementos de la cuantificación (continuación)

Elemento	Definición
Project Name	Nombre del proyecto.

Personalización de informes

El editor de plantillas de informes proporciona una forma de personalizar los informes configurando los encabezados, pies de página y diseños de página. Utilice plantillas de informes tanto para la copia impresa como para los datos exportados a otra aplicación.

La copia impresa incluye varios tipos de elementos:

- **Window:** se abren ventanas en el área de trabajo de la ventana de software, debajo de la barra de herramientas y a la derecha de la barra de navegación. Al imprimir una ventana, se imprime todo lo que se visualiza en ese espacio.
- **Pane:** los paneles son partes de una ventana dispuestos de tal forma que no se superpongan y siempre estén visibles por completo. Por ejemplo, la ventana del editor de método contiene dos paneles: el panel del navegador y el panel del editor de método. Los usuarios pueden imprimir la información de cada panel de la ventana.
- **Report:** los informes son conjuntos estructurados de información creados en el software. Algunos informes se pueden imprimir directamente, como los informes de calibración. Otra información necesita exportarse, como los lotes o las tablas de resultados de cuantificación.

Vista previa, impresión y exportación de informes

Los métodos de adquisición, los lotes, las tablas de resultados de cuantificación y las tablas de resultados de gráficos se pueden exportar como informes. Otros tipos de información, como los datos de las calculadoras, pueden exportarse, pero no pueden personalizarse con una plantilla de informes.

La mayoría de las áreas que aparecen en la pantalla se pueden imprimir. Utilizando la función de vista previa de impresión, los usuarios pueden hacer una vista previa, modificar la escala o copiar gráficos.

Un informe exportado se guarda en un formato de archivo adecuado para programas como Notepad, Microsoft Word o Excel o software LIMS (Sistema de Gestión de Información para Laboratorio).

Exporte los informes en los formatos siguientes:

- csv
- doc
- pdf
- txt

Análisis de datos cuantitativos

Los formatos disponibles dependen de la información que se esté exportando. Por ejemplo, un gráfico se pueden exportar como pdf. Una tabla de datos se puede exportar como archivo txt.

Para incluir información adicional en el encabezado o pie de página del informe, imprima el informe utilizando una plantilla de informe adecuada.

Tabla 6-11: Vista previa, impresión y exportación de informes

Para realizar esta acción	Haga esto
Vista previa de un gráfico	Haga clic en File > Print Preview > Pane.
Imprimir un informe sin una plantilla	Haga clic en File > Print y luego haga clic en el informe que desee imprimir.
Imprimir un informe con una plantilla	<ol style="list-style-type: none">1. Haga clic en File > Print & Report Setup.2. En la sección Report Template, seleccione la plantilla que vaya a utilizar y luego haga clic en OK.
Exportar un informe	<ol style="list-style-type: none">1. Haga clic en File > Export.2. En el campo File, escriba el nombre del archivo.3. En la lista Save as type, seleccione el tipo de archivo.4. Si está exportando un informe en modo cuantificar, seleccione All Columns o Visible Columns en la sección Export y luego haga clic en Save.

Tablas de resultados

Las tablas de resultados resumen la concentración calculada del analito en cada muestra desconocida, basándose en la curva de calibración. Esto incluye también las curvas de calibración y las estadísticas para los resultados.

Exporte los datos de una tabla de resultados a un archivo txt para usarlos en otras aplicaciones, como Microsoft Excel. Se pueden exportar todos los datos de la tabla o solo los datos en las columnas visibles.

Nota: Recomendamos que los usuarios utilicen solamente los métodos controlados, como exportar tablas de resultados y crear informes para la generación de datos desde el software Analyst MD. Otras fuentes para la generación de datos, como copiar y pegar desde las tablas de resultados, no son métodos controlados y no se deben usar.

Los datos de la tabla de resultados se pueden ordenar de tres formas diferentes:

- Ordene rápidamente la tabla de una a tres columnas, utilizando uno de los botones de **Sort**. Estos criterios de ordenación no se pueden guardar.

- Crear un orden específico para la tabla para guardar los criterios de ordenación con la tabla actual. Los órdenes específicos de la tabla posibilitan ordenar la tabla actual en una a tres columnas y guardar el criterio para utilizarlo con esa tabla.
- Utilizar una ordenación predefinida creada previamente. Crear y guardar un orden y aplicarlo luego a una tabla de resultados.

Sugerencia: Para guardar un orden o cualquier otro ajuste de la tabla, haga clic con el botón derecho en la tabla y, a continuación, haga clic en **Table Settings > Export To New Table Settings**. El orden y otros parámetros pueden utilizarse en el proyecto actual. Para utilizar la configuración de la tabla en otro proyecto, cópiela en otro proyecto haciendo clic en **Tools > Project > Copy Data**. Seleccione el **Source Project Name** y **Target Project Name**, marque la casilla de verificación **Table Settings** en Directories y haga clic en **Copy**. Si se van a utilizar **Table Settings** en un nuevo proyecto, hay que crear primero el nuevo proyecto antes de copiar los archivos de **Table Settings**.

Mostrar una disposición específica para las tablas de resultados

La vista predeterminada de las Tablas de resultados es la disposición completa o la disposición resumida. Si hay varios analitos por muestra, cada analito puede verse en la disposición de analito.

Con la tabla Results Table abierta y activa, haga clic con el botón derecho y luego haga clic en uno de los siguientes campos:

Tabla 6-12: Disposiciones de la tabla de resultados

Campo	Descripción
Full	Haga clic para ver la disposición completa.
Summary	Haga clic en el nombre de un campo.
Analyte	Haga clic en un solo analito para ver la disposición del analito. Al ver los resultados de MRM o del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM, los usuarios pueden hacer clic en Analyte para mostrar una lista de identificaciones de compuestos.
Analyte Group	Haga clic en un grupo de analitos para ver la disposición del grupo de analitos. Sugerencia: Primero se debe crear un nuevo grupo de analitos. Para hacerlo, haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en Analyte Group > New .
Sample Type	Haga clic para mostrar un tipo de muestra específico.

Ordenación de los datos en las tablas de resultados

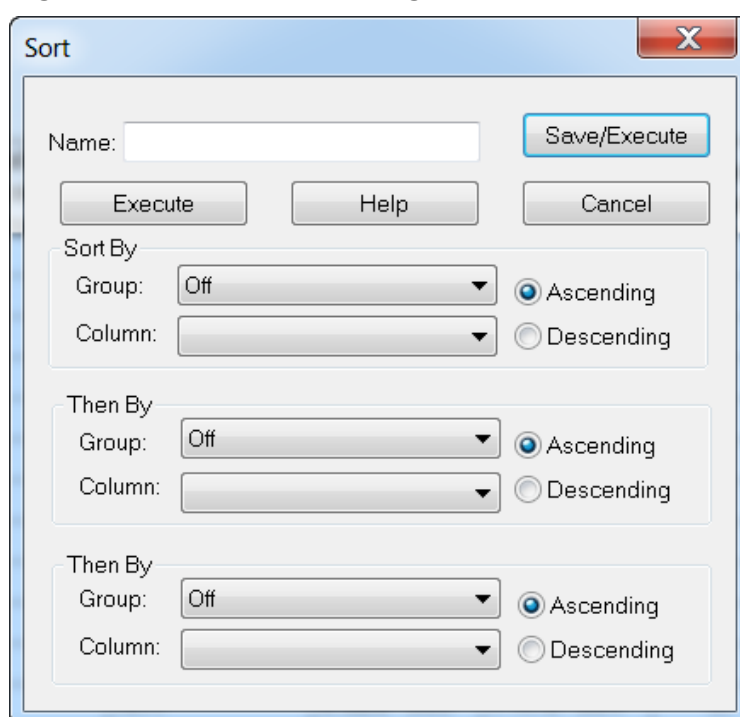
1. Seleccione hasta tres columnas en la tabla de resultados en el orden que necesite.

2. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para ordenar en orden ascendente, haga clic en **A-Z**.
 - Para ordenar en orden descendente, haga clic en **Z-A**.

Ordenación de una tabla de resultados y almacenamiento de los criterios de ordenación

1. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Sort > New**.

Figura 6-13: Cuadro de diálogo Sort

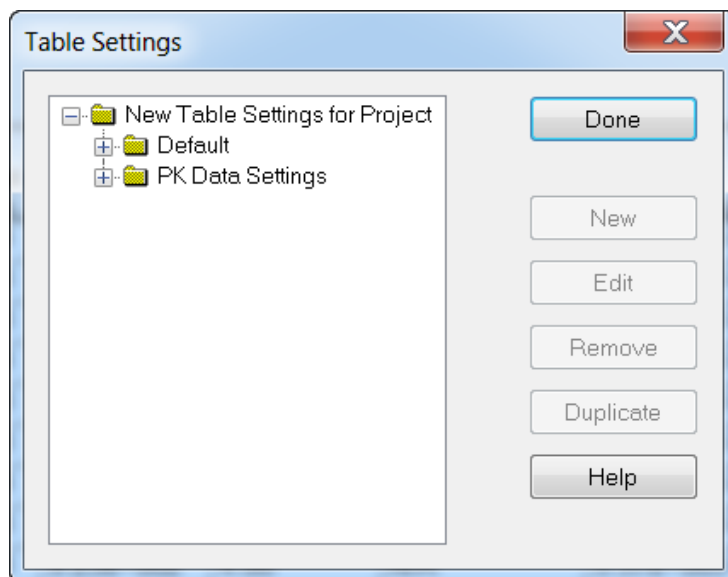


2. En el campo **Name**, escriba el nombre de la nueva ordenación.
3. Para cada regla de ordenación, en las secciones **Sort By** y **Then By**, realice lo siguiente:
 - En la lista **Group**, seleccione el tipo de columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - En la lista **Column**, seleccione la columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - Seleccione la dirección de ordenación: **Ascending** o **Descending**.
4. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para aplicar la ordenación, guardar los criterios de ordenación y cerrar el cuadro de diálogo **Sort**, haga clic en **Save/Execute**.
 - Para aplicar la ordenación y cerrar el cuadro de diálogo **Sort** sin guardar los criterios de ordenación, haga clic en **Execute**.

Almacenamiento de criterios de ordenación predeterminados para futuras tablas de resultados

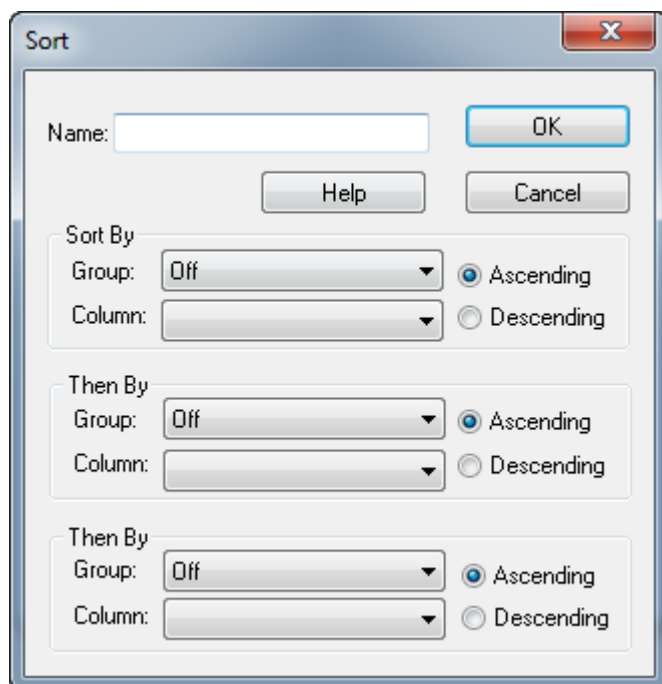
1. Haga clic en **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Figura 6-14: Diálogo Table Settings



2. Expanda la carpeta **Table Settings** y, a continuación, haga doble clic en la carpeta **Default**.
3. Desde la carpeta expandida **Default**, seleccione la carpeta **Sorts**.
4. Haga clic en **New**.

Figura 6-15: Diálogo Sort



5. Escriba un nombre en el campo **Name**.
6. Para cada regla de ordenación que vaya a definir, en la sección Sort By, haga lo siguiente:
 - a. En la lista **Group**, seleccione el tipo de columna.
 - b. En la lista **Column**, seleccione la columna.
 - c. Seleccione la dirección de ordenación: **Ascending** o **Descending**.
7. Para guardar los criterios y cerrar el cuadro de diálogo Sort, haga clic en **OK**.
8. Haga clic en **Done**.

Ordenación de una tabla de resultados mediante criterios de ordenación predefinidos

Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados, haga clic en **Sort** y, a continuación, seleccione el nombre de la clasificación.

Acerca del uso de consultas con las tablas de resultados

Una consulta es una petición de registros de una tabla de resultados que cumplan ciertas condiciones, las cuales se establecen utilizando criterios de selección textuales o matemáticos. Aplique una consulta durante el proceso de generación de una tabla de resultados o después de haberla generado. Estos dos tipos de consultas se denominan consultas predeterminadas y consultas específicas de la tabla. Consulte la sección [Consultas predeterminadas y consultas específicas de la tabla](#).

Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos en una tabla de resultados.

Comparación de resultados entre lotes

El número de analitos y los nombres de analito deben ser los mismos para que se combinen los datos en la ventana Statistics.

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Tools > Statistics**.
3. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para ordenar los resultados por **Results Table**, seleccione **Group By Batch** en la lista **Conc. as Rows**.
 - Para ordenar los datos por orden de concentración, seleccione **Group By Concentration** en la lista **Conc. as Rows**.
 - Para ordenar los datos por orden de concentración sin una fila que muestre las estadísticas para cada grupo o lote, seleccione **Group By Concentration (no All)** en la lista **Conc. as Rows**.

El software ordena los resultados. Al final de cada lote o grupo, se muestra una o dos filas adicionales: **All** (estadísticas para todas las tablas de resultados en ese grupo) y **Average** (estadísticas sobre las estadísticas para ese lote o grupo).

Cómo afectan a los resultados los niveles de concentración

Para todos los controles de calidad y estándares se define la concentración. Si hay un cambio en la precisión del nivel de concentración mayor que la cantidad definida en el campo Variación máx. del cuadro de diálogo Create Default Query, entonces esta información se muestra en la tabla de resultados.

Disposiciones de la tabla de resultados

El software dispone de las siguientes vistas predefinidas de la tabla de resultados.

- [Vista Disposición completa](#)
- [Vista Disposición resumida](#)
- [Vista Disposición de analito](#)
- [Vista Disposición de grupo de analito](#)
- [Vista de disposición completa de muestras](#)

Cada analito de una muestra de varios analitos se puede ver en la vista de disposición de analito. La vista preconfigurada es disposición completa.

Vista Disposición completa

La vista preconfigurada de disposición completa muestra los datos para todos los analitos en el lote de cuantificación. Las columnas que se muestran dependen de qué columnas se han seleccionado en el cuadro de diálogo Results Table Columns y de la configuración seleccionada en la segunda página del asistente de métodos de cuantificación.

Figura 6-16: Vista disposición completa de muestras

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration
1	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 1	2.45e+002	6.02e+001	0.00
2	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 2	1.25e+004	4.63e+003	0.00
3	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.80e+002	2.53e+002	0.00
4	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.39e+004	4.93e+003	0.00
5	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.55e+003	5.08e+002	0.00
6	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.28e+004	4.27e+003	0.00
7	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.32e+003	1.04e+003	0.00
8	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.14e+004	4.20e+003	0.00
9	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.12e+003	2.33e+003	0.00
10	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.23e+004	4.35e+003	0.00
11	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.50e+004	4.77e+003	0.00
12	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.34e+004	4.63e+003	0.00
13	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.70e+004	1.20e+004	0.00
14	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.51e+004	5.29e+003	0.00
15	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.73e+004	2.49e+004	0.00
16	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.50e+004	5.41e+003	0.00
17	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.61e+004	2.44e+004	0.00
18	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	8.04e+003	3.13e+003	0.00

Vista Disposición resumida

La vista Disposición resumida contiene las columnas bloqueadas y el campo elegido para cada analito en las columnas restantes. Por ejemplo, si el área del pico del analito se selecciona desde el menú para dos analitos, y luego se ven las columnas de nombre de la muestra y del área del pico del analito para esos nombres de analito. La vista Disposición resumida también incluye las columnas personalizadas y de fórmula, si estas existen.

Figura 6-17: Vista de las muestras en disposición resumida

	Sample Name	Peak 1	Peak 2
1	B series 0 blank	2.45e+002	1.25e+004
3	B series 0.1 ng/mL	7.80e+002	1.39e+004
5	B series 0.2 ng/mL	1.55e+003	1.28e+004
7	B series 0.5 ng/mL	3.32e+003	1.14e+004
9	B series 1.0 ng/mL	7.12e+003	1.23e+004
11	B series 2.0 ng/mL	1.50e+004	1.34e+004
13	B series 5.0 ng/mL	3.70e+004	1.51e+004
15	B series 10.0 ng/mL	7.73e+004	1.50e+004
17	B series 20.0 ng/mL	7.61e+004	8.04e+003
19	Unknown concentra	1.23e+004	8.39e+003
21	Unknown concentra	8.71e+003	5.71e+003
23	Unknown concentra	1.12e+004	7.18e+003
25	Unknown concentra	1.32e+004	7.36e+003
27	Unknown concentra	1.25e+004	7.14e+003
29	Unknown concentra	1.10e+004	6.50e+003
31	Unknown concentra	1.36e+004	7.94e+003

Vista Disposición de analito

La vista Disposición de analito contiene los datos para un analito específico. Todos los demás analitos están ocultos. Por ejemplo, si se selecciona un analito A, se ven todos los datos para el analito A. Las columnas que se muestran dependen de qué columnas se han seleccionado en el cuadro de diálogo Results Table Columns y de la configuración seleccionada en la segunda página del asistente de métodos de cuantificación.

Una vista Analyte Layout, con el pico 1 seleccionado, tendrá un aspecto parecido al siguiente gráfico. En esta vista, se excluyen todas las demás filas mostradas en la vista disposición completa.

Figura 6-18: Vista Sample Analyte Layout

	Sample Name	File Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration	Use Record	Record Modified
1	B series 0 blank	QuanData.Wiff	2.45e+002	6.02e+001	0.00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3	B series 0.1 ng/mL	QuanData.Wiff	7.80e+002	2.53e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5	B series 0.2 ng/mL	QuanData.Wiff	1.55e+003	5.08e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
7	B series 0.5 ng/mL	QuanData.Wiff	3.32e+003	1.04e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9	B series 1.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.12e+003	2.33e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
11	B series 2.0 ng/mL	QuanData.Wiff	1.50e+004	4.77e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
13	B series 5.0 ng/mL	QuanData.Wiff	3.70e+004	1.20e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
15	B series 10.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.73e+004	2.49e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
17	B series 20.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.61e+004	2.44e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
19	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.23e+004	4.30e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
21	Unknown concentra	QuanData.Wiff	8.71e+003	2.53e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
23	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.12e+004	3.40e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
25	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.32e+004	4.24e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
27	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.25e+004	4.04e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
29	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.10e+004	3.96e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
31	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.36e+004	5.16e+003	N/A	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Vista Disposición de grupo de analito

La vista Disposición de grupo de analito contiene los datos de los analitos que pertenecen a un grupo determinado. Las columnas seleccionadas que se ven en el cuadro Results Table Columns se mostrarán en la tabla de resultados. Consulte el siguiente gráfico. Muestre la columna con el nombre **Analyte Peak Name** en la tabla de resultados para mostrar los nombres de los analitos que pertenecen al grupo.

Figura 6-19: Vista de las muestras Disposición de grupo de analito

Formula:		Analyte Group: Minoxidols Only			
		Query: None			
		Idle			
		Sort : Unsorted			
	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

Vista de disposición completa de muestras

La disposición del tipo de muestra permite al usuario filtrar la tabla de resultados por tipo de muestra.

Figura 6-20: Vista de disposición completa de muestras

		Sample Type: Standard		
		Query: None		
		Idle		
		Sort : Unsorted		
	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)
1	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.63e+005
2	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.68e+005
3	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.31e+005
4	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.11e+005
5	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.58e+005
6	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.76e+005
7	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.72e+005
8	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.94e+005
9	STD 5	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.61e+005

Campos de la tabla de resultados

Añada columnas a la tabla de resultados estándar para mostrar los datos de DAD (detector de diodos en serie) para los campos de Analyte, Internal Standard y Record.

Campos de fórmulas

Los campos de fórmulas muestran el resultado de una fórmula al estilo de una hoja de cálculo que hayan definido los usuarios. El campo Fórmula ubicado en la parte superior de la tabla de resultados se muestra solamente si en la tabla de resultados hay al menos una columna de fórmulas. El campo Formula se activa cuando se seleccionan las celdas de la columna Formula. El botón de eliminación de la columna de fórmula debajo del campo Fórmula también está disponible cuando se selecciona la columna de fórmula.

Recomendamos que el usuario valide los resultados si se utiliza una columna de fórmula.

Campos personalizados

Los campos personalizados contienen información definida durante el proceso de adquisición. Cuando adquieren muestras, los usuarios pueden crear columnas personalizadas y definir el tipo de datos para rellenarlas. Una vez que la columna personalizada forma parte de la tabla de resultados, se puede tratar como cualquier otra columna (por ejemplo, moverla, ocultarla, basar una fórmula en ella).

Campos de columna de estándares internos

Las columnas del estándar interno en la Tabla de resultados muestran información sobre el estándar interno después del análisis. La siguiente tabla muestra los campos disponibles.

Tabla 6-13: Columnas de estándares internos

Columnas	Descripción
IS Peak Name	El nombre del pico del estándar interno (IS).
IS Units	Las unidades en las que se da el estándar interno.
IS Peak Area	El área del pico del estándar interno.
IS Peak Height	La altura del pico del estándar interno.
IS Concentration	La concentración conocida del estándar interno. Esto se aplica a los tipos de muestras estándar y de control de calidad. Se muestran ceros para los tipos de muestras de disolventes, blancos y blancos dobles. N/A se muestra para los desconocidos.
IS Retention Time	El tiempo de retención cromatográfico determinado por el software.
IS Expected Retention Time	El tiempo de retención de la muestra representativa. Se obtiene del método de cuantificación.
IS Retention Time Window	La ventana del tiempo de retención según se especifica en el método de cuantificación.

Tabla 6-13: Columnas de estándares internos (continuación)

Columnas	Descripción
IS Centroid Location	El tiempo de retención promedio del analito, ponderado por la intensidad. Se identifican las áreas de pico hasta y después de este punto de tiempo.
IS Start Scan	El número de ciclo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que comienza el pico.
IS Start Time	El tiempo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que comienza el pico.
IS Stop Scan	El número de ciclo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que finaliza el pico.
IS Stop Time	El tiempo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que finaliza el pico.
IS Integration Type	El método mediante el cual se buscó e integró la línea de referencia cuando se encontró el pico. Los tipos son manual y automático (Baseline-to-Baseline , Valley , Exponential Skim y Exponential Child).
IS Signal to Noise	La relación señal/ruido del pico.
IS Peak Width	La proporción entre la altura del pico y su anchura.
IS UV Range	El rango UV del estándar interno.
IS UV Channel	El canal UV del estándar interno.
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(Solo lectura) La anchura de pico al 50 % de la altura del pico.
IS Baseline Slope (%/min.)	(Solo lectura) La columna que muestra la pendiente de la línea de referencia.
IS Peak Asymmetry	<p>(Solo lectura) La columna que muestra la asimetría del pico, que se calcula mediante la fórmula siguiente:</p> $\frac{[(\text{Tiempo final del pico}) - (\text{Tiempo de retención})]}{[(\text{Tiempo de retención}) - (\text{Tiempo inicial del pico})]}$ <p>Los valores cercanos a 1,0 indican picos simétricos, los valores mayores de 1,0 indican picos de bajada y los valores menores de 1,0 indican picos de subida.</p>
IS Processing Alg	(Solo lectura) la columna que muestra el algoritmo de procesamiento utilizado.

Tabla 6-13: Columnas de estándares internos (continuación)

Columnas	Descripción
IS Integration Quality	El índice Integration Quality indica la medida en que se integra el pico. Los valores próximos a 1 indican picos correctamente integrados y los valores próximos a 0 indican picos integrados deficientemente.

Campos de registro

Las columnas **Record** en la Tabla de resultados contienen información adicional sobre cada registro de muestras (información que es aplicable solamente al analito, no al patrón interno). La siguiente tabla muestra los campos disponibles.

Tabla 6-14: Columnas de registro

Columnas	Descripción
Use Record	Indica si este registro debería incluirse en la calibración. Se aplica a patrones y controles de calidad. Si la casilla de verificación está en blanco, entonces los patrones y controles de calidad no utilizados se tachan en la tabla de estadísticas.
Record Modified	Indica si el método de cuantificación utilizado para el registro se ha modificado de algún modo respecto al original.
Calculated Concentration	La concentración calculada del analito según se calcula utilizando la curva de calibración.
Relative Retention Time	La proporción entre los tiempos de retención del patrón interno y del analito.
Accuracy	La concentración calculada dividida entre la concentración conocida (como porcentaje).
Response Factor	El área o altura del pico (dependiendo de la opción de regresión) dividida entre la concentración del analito.

Columnas de analitos

Las columnas de analitos en la tabla de resultados contienen información sobre todos los analitos y estándares internos (si se ha utilizado uno) después del análisis. La siguiente tabla muestra los campos disponibles.

Tabla 6-15: Tablas de resultados: columnas de analitos

Columna	Descripción
Analyte Peak Name	Nombre del analito.
Analyte Units	Las unidades en las que se dan las concentraciones de los analitos.
Analyte Peak Area	El área del analito.

Tabla 6-15: Tablas de resultados: columnas de analitos (continuación)

Columna	Descripción
Analyte Peak Height	La altura del pico del analito.
Analyte Concentration	La concentración real, conocida, del analito. Esto se aplica a los tipos de muestras estándar y de control de calidad. Se muestran ceros para los tipos de muestras de disolventes, blancos y blancos dobles. Se muestra N/D para las desconocidas.
Analyte Retention Time	El tiempo de retención cromatográfico determinado por el software.
Analyte Expected Retention Time	El tiempo de retención de la muestra representativa según se obtiene del método de cuantificación.
Analyte Retention Time Window	La ventana del tiempo de retención según se especifica en el método de cuantificación.
Analyte Centroid Location	El tiempo de retención promedio del analito, ponderado por la intensidad. Se identifican las áreas de pico hasta y después de este punto de tiempo.
Analyte Start Scan	El número de ciclo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que comienza el pico.
Analyte Start Time	El tiempo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que comienza el pico.
Analyte Stop Scan	El número de ciclo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que finaliza el pico.
Analyte Stop Time	El tiempo asociado a la combinación de experimentos o periodos en el que finaliza el pico.
Analyte Integration Type	El método mediante el cual se buscó e integró la línea de referencia cuando se encontró el pico. Los tipos son manuales y automáticos (Línea de referencia a línea de referencia, Valle, Separación exponencial y Secundario exponencial).
Analyte Signal to Noise	La relación señal/ruido del pico en comparación con la línea de referencia.
Analyte Peak Width	La proporción entre la altura del pico y su anchura.
Analyte UV Range	El intervalo UV del analito.
Analyte UV Channel	El canal UV del analito.

Tabla 6-15: Tablas de resultados: columnas de analitos (continuación)

Columna	Descripción
Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)	(Solo lectura) La columna que muestra la anchura de pico al 50 % de la altura del pico.
Analyte Baseline Slope (%/min.)	(Solo lectura) La columna que muestra la pendiente de la línea de referencia.
Analyte Peak Asymmetry	<p>(Solo lectura) La columna que muestra la asimetría del pico, que se calcula mediante la fórmula siguiente:</p> $[(\text{Tiempo final del pico}) - (\text{Tiempo de retención})] / [(\text{Tiempo de retención}) - (\text{Tiempo inicial del pico})]$ <p>Los valores cercanos a 1,0 indican picos simétricos, los valores mayores de 1,0 indican picos de bajada y los valores menores de 1,0 indican picos de subida.</p>
Analyte Processing Alg	Una columna de solo lectura que muestra el algoritmo de procesamiento utilizado.
Analyte Integration Quality	El índice Integration Quality indica la medida en que se integra el pico. Los valores próximos a 1 indican picos correctamente integrados y los valores próximos a 0 indican picos integrados deficientemente. Esto facilita la revisión de los picos, ya que los usuarios pueden visualizar los picos con valores bajos de calidad de integración del analito, para revisarlos manualmente. Además, los usuarios pueden realizar una consulta sobre los datos para mostrar los valores de calidad de integración del analito que sean inferiores al valor que consideren aceptable, y revisar manualmente un subconjunto de datos.

Columnas de muestra

Las columnas de muestra en la Tabla de resultados muestran información sobre la muestra que es común a todos los analitos. Blanco y blanco doble se pueden definir de forma diferentes dependiendo del laboratorio. Las siguientes tablas muestran los campos disponibles.

Tabla 6-16: Columnas de muestra

Columna	Descripción
Sample Name	El nombre que el usuario asignó a la muestra cuando esta se adquirió.
Sample ID	Un identificador definido por el usuario y asociado a la muestra.

Tabla 6-16: Columnas de muestra (continuación)

Columna	Descripción
Sample Type	<p>Todos los analitos dentro de una muestra deben tener el mismo tipo de muestra. Aparece uno de los siguientes tipos de muestra:</p> <p>Unknown: contiene analitos cuyas concentraciones están por determinar.</p> <p>Standard: una muestra con una concentración de analitos conocida. Se utiliza para la calibración.</p> <p>Quality Control: una muestra con una concentración de analitos conocida. Se utiliza para comprobar la exactitud de la curva de calibración.</p> <p>Solvent: confirma que el espectrómetro de masas está limpio. Los disolventes no pasan por el proceso de preparación de muestras.</p> <p>Blank: una muestra con concentración cero que no se utiliza en la regresión.</p> <p>Double Blank: una muestra preparada sin un patrón interno o analito de muestra. Confirma que el proceso de extracción no ha añadido nada.</p>
Sample Comment	Un comentario describiendo la muestra.
Set Number	Un número que identifica un subconjunto de un lote entero.
Acquisition Method	El nombre del método utilizado para adquirir las muestras.
Acquisition Date	La fecha y hora en la que se ejecutó la adquisición.
Rack Type	Un identificador asociado al tipo de bastidor del procesador de muestras automático que se ha utilizado (en caso de que se haya utilizado).
Rack Number	La posición del bastidor en el que se colocó la muestra cuando se adquirió. (En procesadores de muestras automáticos de un solo bastidor, este número es siempre 1).
Vial Position	La posición en la placa del procesador de muestras automático en el que se encontraba el vial.
Plate Type	Un identificador para el tipo de placa utilizado (solo bastidores de placa múltiple).
Plate Number	La posición de la placa en el bastidor (solo bastidores de placa múltiple).
File Name	El nombre del archivo de datos sin procesar. Este nombre no es único, porque en un solo archivo de datos pueden estar contenidos los datos de muchas muestras.

Tabla 6-16: Columnas de muestra (continuación)

Columna	Descripción
Dilution Factor	El grado en el que se ha diluido la muestra. Se utiliza para determinar la concentración calculada.
Sample Annotation	Comentarios adicionales que describen la muestra.
Weight-to-Volume Ratio	La relación entre peso y volumen de la muestra.

Tabla 6-17: Columnas DAD

Columna	Descripción
Analyte Peak Area for DAD	El área del pico del analito (mAU/min).
Analyte Peak Height for DAD	La altura del pico del analito (mAu).
Analyte Wavelength Ranges	El rango de longitudes de onda (nm).
IS Peak Area for DAD	El área del pico del estándar interno (mAU/min).
IS Wavelength Ranges	El rango de longitudes de onda (nm).
IS Peak Height for DAD	La altura del pico del patrón interno (mAU). Concentración calculada para DAD.

La siguiente tabla muestra los campos que se pueden añadir a la tabla de resultados para los datos adquiridos mediante un ADC (convertidor analógico/digital).

Tabla 6-18: Columnas ADC

Columna	Descripción
Analyte Channel	El canal del ADC desde el cual se ha adquirido el analito.
Analyte Wavelength Ranges	El rango de longitudes de onda (nm).
IS Channel	El canal del ADC desde el cual se ha adquirido el estándar interno.
IS Wavelength Ranges	El rango de longitudes de onda (nm).

Consejos para la tabla de resultados

Para realizar esta acción...	...haga esto
Consultas específicas de la tabla: para ver de nuevo la tabla completa	Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar de la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en Query > Show All . La consulta se puede volver a aplicar o editar.
Para examinar curvas de calibración	Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar de la curva, haga clic en Active Plot y seleccione la curva que se va a representar en la parte superior.
Revisión de estadísticas de muestras: para revisar un pico individual	Seleccione la casilla de verificación Display the Data Set(s) y, a continuación, en la columna Data Point, haga doble clic en el punto de datos que representa el pico. El software muestra la ventana Peak Review con el pico seleccionado por el usuario.
Tablas de resultados: para devolver la tabla de resultados a su orden original	Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y haga clic en Sort > Sort By Index .

Iconos de la barra de herramientas A










Icono	Nombre	Función
	Sustracción de fondo	Realiza una sustracción de fondo después de seleccionar los rangos de fondo.
	Subtract Range Locked	Bloquea los rangos de fondo seleccionados. Si los rangos de fondo se desbloquean, los usuarios pueden mover cada rango de manera independiente.
	Centroide	Calcula el centroide de los datos.
	Gráfico de inicio	Devuelve el gráfico a la escala original.
	Superponer	Superpone gráficos.
	Someter las superposiciones a ciclos	Alternar entre gráficos superpuestos.
	Sumar superposiciones	Suma los gráficos.
	Mostrar herramienta de interpretación de fragmentos	Abre la herramienta Fragment Interpretation, que calcula los fragmentos de la escisión de enlaces no cíclicos individuales a partir de un archivo .mol.
	Suavizado	Suaviza los datos mediante el algoritmo de suavización.
	Suavizado gaussiano	Suaviza los datos mediante el algoritmo de suavizado gaussiano.

Tabla de masas exactas PPG

B

La siguiente tabla muestra las masas monoisotópicas exactas y las especies cargadas (positivas y negativas) registradas con las soluciones de calibración de PPG (glicol de polipropileno). Las masas e iones se calcularon utilizando la fórmula $M = H[OC_3H_6]_nOH$, mientras que los fragmentos MS/MS de los iones positivos utilizaron la fórmula $[OC_3H_6]_n(H^+)$. En todos los cálculos, $H = 1,007825$, $O = 15,99491$, $C = 12,00000$ y $N = 14,00307$.

Nota: Al llevar a cabo la calibración con las soluciones de PPG, asegúrese de utilizar el pico de isótopos correcto.

Tabla B-1: Masas exactas PPG

n	Masa exacta (M)	$(M + NH_4)^+$	Fragmentos MS/MS	$(M + 2NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76,052	94,087	59,0	56,061	121,050
2	134,094	152,129	117,1	85,082	179,092
3	192,136	210,171	175,1	114,102	237,134
4	250,178	268,212	233,2	143,123	295,176
5	308,220	326,254	291,2	172,144	353,218
6	366,262	384,296	349,2	201,165	411,259
7	424,304	442,338	407,3	230,186	469,301
8	482,346	500,380	465,3	259,207	527,343
9	540,388	558,422	523,4	288,228	585,385
10	598,430	616,464	581,4	317,249	643,427

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
11	656,471	674,506	639,4	346,270	701,469
12	714,513	732,548	697,5	375,291	759,511
13	772,555	790,590	755,5	404,312	817,552
14	830,597	848,631	813,6	433,333	875,594
15	888,639	906,673	871,6	462,354	933,636
16	946,681	964,715	929,7	491,373	991,678
17	1004,723	1022,757	987,7	520,396	1049,720
18	1062,765	1080,799	1045,7	549,417	1107,762
19	1120,807	1138,841	1103,8	578,438	1165,804
20	1178,849	1196,883	1161,8	607,459	1223,845
21	1236,890	1254,925	1219,9	636,480	1281,887
22	1294,932	1312,967	1277,9	665,501	1339,929
23	1352,974	1371,009	1335,9	694,521	1397,971
24	1411,016	1429,050	1394,0	723,542	1456,013
25	1469,058	1487,092	1452,0	752,563	1514,055
26	1527,100	1545,134	1510,1	781,584	1572,097
27	1585,142	1603,176	1568,1	810,605	1630,138

Tabla de masas exactas PPG

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
28	1643,184	1661,218	1626,2	839,626	1688,180
29	1701,226	1719,260	1684,2	868,647	1746,222
30	1759,268	1777,302	1742,2	897,668	1804,264
31	1817,309	1835,344	1800,3	926,689	1862,306
32	1875,351	1893,386	1858,3	955,710	1920,348
33	1933,393	1951,428	1916,4	984,731	1978,390
34	1991,435	2009,469	1974,4	1013,752	2036,431
35	2049,477	2067,511	2032,5	1042,773	2094,473
36	2107,519	2125,553	2090,5	1071,794	2152,515
37	2165,561	2183,595	2148,5	1100,815	2210,557
38	2223,603	2241,637	2206,6	1129,836	2268,599
39	2281,645	2299,679	2264,6	1158,857	2326,641
40	2339,687	2357,721	2322,7	1187,878	2384,683
41	2397,728	2415,783	2380,7	1216,899	2442,724
42	2455,770	2473,805	2438,7	1245,920	2500,766
43	2513,812	2531,847	2496,8	1274,940	2558,808
44	2571,854	2589,888	2554,8	1303,961	2616,850

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
45	2629,896	2647,930	2612,9	1332,982	2674,892
46	2687,938	2705,972	2670,9	1362,003	2732,934
47	2745,980	2764,014	2729,0	1391,024	2790,976
48	2804,022	2822,056	2787,0	1420,045	2849,017
49	2862,064	2880,098	2845,0	1449,066	2907,059
50	2920,106	2938,140	2903,1	1478,087	2965,101
51	2978,147	2996,182	2961,1	1507,108	3023,143
52	3036,189	3054,224	3019,2	1536,129	3081,185
53	3094,231	3112,266	3077,2	1565,150	3139,227
54	3152,273	3170,307	3135,2	1594,171	3197,269
55	3210,315	3228,349	3193,3	1623,192	3255,311
56	3268,357	3286,391	3251,3	1652,213	3313,352
57	3326,399	3344,433	3309,4	1681,234	3371,394
58	3384,441	3402,475	3367,4	1710,255	3429,436
59	3442,483	3460,517	3425,5	1739,276	3487,478
60	3500,525	3518,559	3483,5	1768,297	3545,5202
61	3558,566	3576,601	3541,5	1797,318	3603,562

Tabla de masas exactas PPG

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
62	3616,608	3634,643	3599,6	1826,339	3661,604
63	3674,650	3692,685	3657,6	1855,359	3719,645
64	3732,692	3750,726	3715,7	1884,380	3777,687
65	3790,734	3808,768	3773,7	1913,401	3835,729
66	3848,776	3866,810	3831,7	1942,422	3893,771
67	3906,818	3924,852	3889,8	1971,443	3951,813
68	3964,860	3982,894	3947,8	2000,464	4009,855
69	4022,902	4040,936	4005,9	2029,485	4067,897
70	4080,944	4098,978	4063,9	2058,506	4125,938
71	4138,985	4157,020	4122,0	2087,527	4183,980
72	4197,027	4215,062	4180,0	2116,548	4242,022
73	4255,069	4273,104	4238,0	2145,569	4300,064
74	4313,111	4331,145	4296,1	2174,590	4358,106
75	4371,153	4389,187	4354,1	2203,611	4416,148
76	4429,195	4447,229	4412,2	2232,632	4474,190
77	4487,237	4505,271	4470,2	2261,653	4532,231
78	4545,279	4563,313	4528,3	2290,674	4590,273

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MS/MS	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
79	4603,321	4621,355	4586,3	2319,695	4648,315
80	4661,363	4679,397	4644,3	2348,716	4706,357
81	4719,404	4737,439	4702,4	2377,737	4764,399
82	4777,446	4795,481	4760,4	2406,758	4822,441

Contacto

Formación del cliente

- En América del Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fuera de la UE y América del Norte, visite sciex.com/education para obtener información de contacto.

Centro de aprendizaje en línea

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Soporte SCIEX

SCIEX y sus representantes cuentan con un equipo de especialistas técnicos y de servicio totalmente cualificados en todo el mundo. Ellos sabrán resolver sus dudas y preguntas sobre el sistema y cualquier problema técnico que pueda surgir. Para obtener más información, visite el sitio web de SCIEX en sciex.com o póngase en contacto con nosotros de una de las siguientes formas:

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Ciberseguridad

Para obtener las indicaciones sobre ciberseguridad más recientes para los productos SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentación

Esta versión del documento sustituye a todas las versiones anteriores de este documento.

Para ver este documento electrónicamente se necesita Adobe Acrobat Reader. Para descargar la última versión, vaya a <https://get.adobe.com/reader>.

Para buscar la documentación relacionada con el producto de software, consulte las notas de la versión o la guía de instalación del software que se suministra con el software.

Para localizar la documentación relacionada con los productos de hardware, consulte el DVD *Customer Reference* que se suministra con el sistema o componente.

Nota: Para solicitar una versión impresa y gratuita de este documento, póngase en contacto con sciex.com/contact-us.
