
Software Analyst MD

Tutorial Sobre Adquisición Dependiente de Información



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.

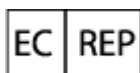
Rx only.

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: Tutorial sobre adquisición dependiente de información.....	5
Acerca de los métodos IDA.....	5
Documentación relacionada.....	6
Requisitos previos.....	6
 Capítulo 2: Crear métodos IDA.....	 7
Crear un método IDA utilizando el asistente de método IDA con un sistema triple cuadripolo.....	7
Crear un método IDA utilizando el asistente de método IDA con un sistema LIT.....	9
Crear un método IDA utilizando el editor del método de adquisición	11
Crear un método IDA utilizando un análisis de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM.....	13
Crear un método IDA utilizando dos análisis de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM.....	14
Acerca del cambio de polaridad.....	15
Acerca de los marcadores.....	16
Impacto del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro en IDA.....	17
Creación de un método de adquisición para el algoritmo IDA <i>Scheduled</i> MRM Pro.....	17
Crear un método IDA utilizando la ionización programada	18
 Capítulo 3: Ver datos IDA.....	 19
Definir las opciones del IDA Explorer.....	19
Ver datos IDA.....	20
Visualización de los datos IDA si el IDA Explorer no está activo.....	21
Acerca del algoritmo Dynamic Background Subtraction.....	23
Acerca del tiempo dinámico de llenado.....	24
Iconos.....	24
 Contacto.....	 26
Formación del cliente.....	26
Centro de aprendizaje en línea.....	26
Soporte SCIEX.....	26
Ciberseguridad.....	26
Documentación.....	26

Tutorial sobre adquisición dependiente de información

1

Acerca de los métodos IDA

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

Cree un método IDA con hasta dos análisis de estudio y ocho análisis dependientes en un único período. El análisis de estudio se utiliza en el IDA para llevar a cabo experimentos adicionales. Como análisis de estudio, se puede utilizar cualquiera de los siguientes:

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

Los siguientes son análisis dependientes:

- EPI
- MS/MS/MS (MS3) (análisis dependiente de segundo nivel)

En un experimento IDA, las acciones del espectrómetro de masas varían en cada análisis en función de los datos adquiridos en el análisis 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. Establezca los criterios que activarán un experimento IDA, así como los parámetros del método que se deben utilizar.

El método IDA modifica los experimentos y mejora los resultados 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

Si la polaridad no se va a cambiar durante el ciclo, el número de experimentos dependientes debe coincidir con el número de iones más intensos en la pestaña IDA Critería.

Documentación relacionada

- Guía de usuario del sistema del espectrómetro de masas
- *Guía para usuarios avanzados*
- *Tutorial del algoritmo Scheduled MRM*
- Ayuda del software Analyst MD.

Requisitos previos

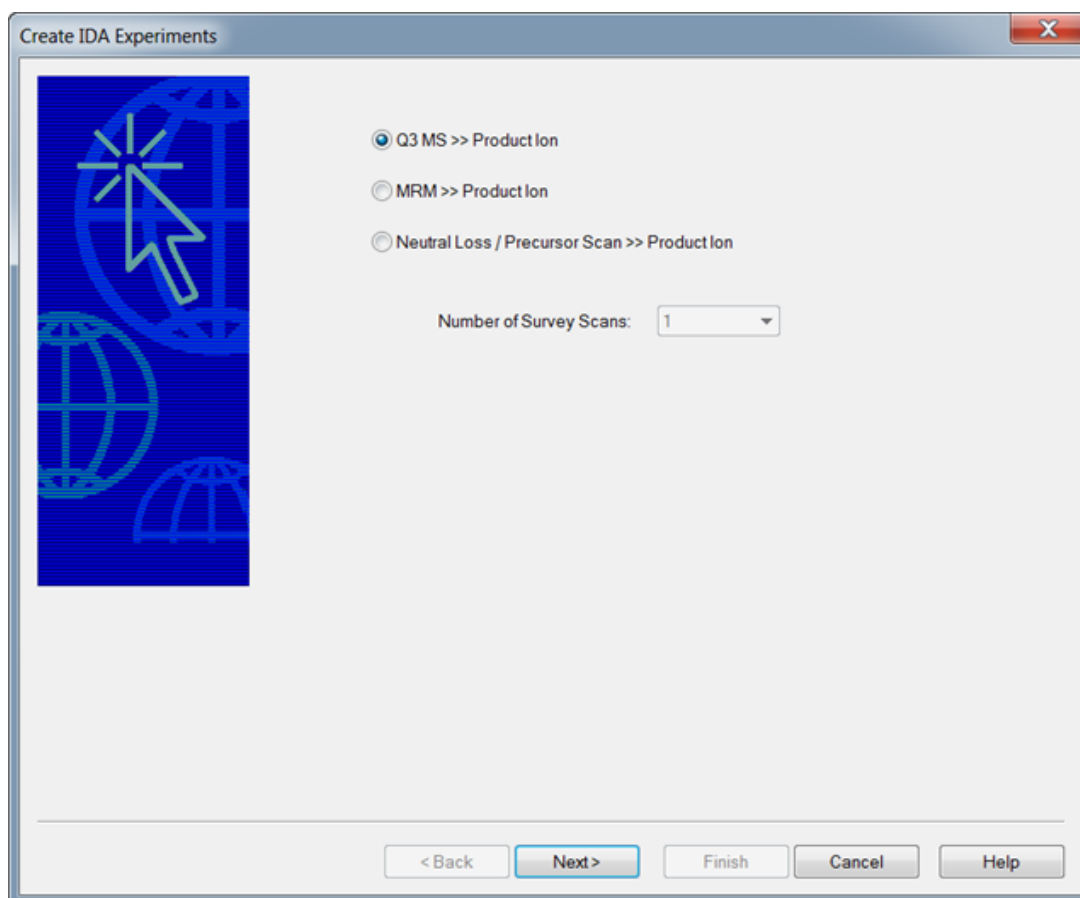
Requisitos previos
Los usuarios podrán: <ul style="list-style-type: none">• Crear un método de adquisición• Enviar un lote

Utilice el asistente de método IDA para crear métodos de adquisición IDA triple cuadrupolo y de trampa de iones lineal (LIT). Puede utilizar cualquier combinación de dos análisis de estudio. Si se selecciona EPI como análisis de estudio, la pestaña IDA–Second Level Criteria está disponible. Si se utilizan esos experimentos de análisis, no se puede establecer un nivel adicional de criterios de IDA.

Crear un método IDA utilizando el asistente de método IDA con un sistema triple cuadrupolo

1. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **IDA Method Wizard**.

Figura 2-1: Página de creación de experimentos IDA



2. Seleccione el tipo de análisis **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion**.
3. En la lista **Number of Survey Scans**, seleccione el número de análisis que se tienen que llevar a cabo y, a continuación, haga clic en **Next**.

Crear métodos IDA

Aparece la página Survey Scan. La apariencia de esta página va a depender del tipo de análisis seleccionado.

4. Configure los parámetros y haga clic en **Next**.

Se abrirá la página Dependent Scan – Product Ion Scan.

5. Seleccione el número de picos que se va a supervisar, configure los parámetros de análisis y haga clic en **Next**.

Se muestra la página Dependent Scan – IDA Criteria.

Nota: Asegúrese de que el intervalo IDA es el mismo que el del análisis de estudio o que se encuentra dentro de este.

6. Para seleccionar el rango de masas de los iones, escriba los límites superior e inferior. Se llevará a cabo un análisis dependiente para las masas en este rango.
7. En el campo **Which exceed**, escriba el número de recuentos por segundo necesarios para activar un análisis dependiente.
8. En el grupo **Exclude Former Target Ions**, realice una de las siguientes acciones:
 - Para ignorar todos los iones objetivo anteriores que aparecen en el experimento IDA, seleccione **Always**.
 - Para ignorar todos los iones objetivo anteriores después de un número especificado de sucesos, seleccione **Always**, haga clic en **After** e introduzca el número de sucesos.
 - Para ignorar los iones objetivo anteriores durante un periodo de tiempo especificado, seleccione **For** e introduzca el número de segundos durante el cual los iones van a ignorarse.
 - Para ignorar los iones objetivo anteriores durante un periodo de tiempo después de un número especificado de sucesos, seleccione **For** y escriba el número de segundos durante el cual los iones van a ignorarse. A continuación, seleccione **After** e introduzca el número de sucesos.

Sugerencia: Para reconocer todos los iones objetivo anteriores en el experimento IDA, finalice el asistente. A continuación, en la pestaña IDA - First Level Criteria del Acquisition Method Editor, en **Exclude former target ions**, haga clic en **Never**.

9. Para excluir los iones objetivo anteriores tras un número especificado de sucesos, en el grupo **Exclude Former Target Ions**, seleccione **After X occurrences** e introduzca el número de veces que un ion objetivo anterior debe detectarse antes de poder ser excluido de análisis futuros.
10. Haga clic en **Finish**.

El experimento IDA se abre automáticamente en el editor Acquisition Method. Podrá editar los métodos de LC y otros criterios de IDA, por ejemplo, las listas de inclusión y exclusión.
11. Revise el método de MS y edite los parámetros y otros criterios de IDA si es necesario.

12. Agregue los dispositivos si no están ya incluidos y actualice todos los parámetros correspondientes.

Sugerencia: Puede actualizar todos los parámetros del gas de la fuente de iones. En la pestaña MS, haga clic en **Edit Parameters**. En la pestaña , escriba los valores correspondientes. A continuación, seleccione la casilla **Source/Gas** situada en la parte inferior para aplicar los parámetros a todos los experimentos.

13. Guarde el archivo del método de adquisición.

Crear un método IDA utilizando el asistente de método IDA con un sistema LIT

1. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **DA Method Wizard**. Aparece la página de creación de experimentos IDA.
2. En el grupo **Type of IDA Experiment**, seleccione el tipo de análisis de estudio y, a continuación, haga clic en **Next**.
3. Si el tipo de análisis **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** está seleccionado, en la lista **Number of Survey Scans**, seleccione el número de análisis que se deben llevar a cabo.
4. Para confirmar que el experimento IDA ha adquirido datos que coinciden con el estado de carga o el patrón de isótopos especificado por el usuario antes de realizar el análisis dependiente, seleccione la casilla de verificación **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern**.
5. Para añadir un análisis MS3 al experimento, seleccione la casilla de verificación **Enable MS3 Experiment generation**.
6. Para que el software calcule dinámicamente el tiempo de llenado adecuado para el LIT, asegúrese de que la casilla de verificación **Dynamic Fill Time** esté seleccionada.
7. Haga clic en **Next**.
Se abrirá la página de análisis de estudio. El aspecto de este cuadro de diálogo variará en función del estudio de análisis seleccionado.
8. Edite los parámetros en función del tipo de análisis y haga clic en **Next**.
Se abrirá la página Análisis dependiente: ion producto mejorado (EPI).
9. Seleccione el número de picos que se va a supervisar, configure los parámetros de análisis y haga clic en **Next**.
Se muestra la página Dependent Scan – IDA Criteria.
10. Para seleccionar el rango de masas de los iones, escriba los límites superior e inferior. Se llevará a cabo un análisis dependiente para las masas en este rango.
11. En el campo **Which exceed**, escriba el número de recuentos por segundo necesarios para activar un análisis dependiente.
12. Para especificar el rango de estados de carga para el experimento IDA, seleccione la casilla de verificación **With charge state X to Y charges** y, a continuación, haga clic en los estados de carga.

Crear métodos IDA

Sugerencia: El intervalo de estado de carga depende de la determinación adecuada de la relación de isótopos. Por tanto se puede utilizar un análisis ER para confirmar el estado de carga.

13. Para incluir picos con estados de carga desconocidos, seleccione la casilla **Include unknowns**.
14. En el grupo **Exclude Former Target Ions**, realice una de las siguientes acciones:
 - Para ignorar todos los iones objetivo anteriores que aparecen en el experimento IDA, seleccione **Always**.
 - Para reconocer todos los iones objetivo anteriores que aparecen en el experimento IDA, seleccione **Never**.
 - Para ignorar los iones objetivo anteriores durante un periodo de tiempo especificado, seleccione **For** e introduzca el número de segundos durante el cual los iones van a ignorarse.
 - Para ignorar los iones objetivo anteriores durante un periodo de tiempo después de un número especificado de sucesos, seleccione **For** y escriba el número de segundos durante el cual los iones van a ignorarse. A continuación, seleccione **After** e introduzca el número de sucesos.
 - Para ignorar todos los iones objetivo anteriores después de un número especificado de sucesos, seleccione **Always**, haga clic en **After** e introduzca el número de sucesos.
15. Para excluir los iones objetivo anteriores tras un número especificado de sucesos, en el grupo **Exclude Former Target Ions**, seleccione **After X occurrences** e introduzca el número de veces que un ion objetivo anterior debe detectarse antes de poder ser excluido de análisis futuros.
16. Haga clic en **Finish**.
El experimento IDA se abre automáticamente en el editor Acquisition Method. Podrá editar los métodos de LC y otros criterios de IDA, por ejemplo, las listas de inclusión y exclusión.
17. Revise el método de MS y edite los parámetros y otros criterios de IDA si es necesario.
18. Agregue los dispositivos si no están ya incluidos y actualice todos los parámetros correspondientes.

Sugerencia: Puede actualizar todos los parámetros del gas de la fuente de iones. En la pestaña MS, haga clic en **Edit Parameters**. En la pestaña , escriba los valores correspondientes. A continuación, seleccione la casilla **Source/Gas** situada en la parte inferior para aplicar los parámetros a todos los experimentos.

19. Guarde el archivo del método de adquisición.

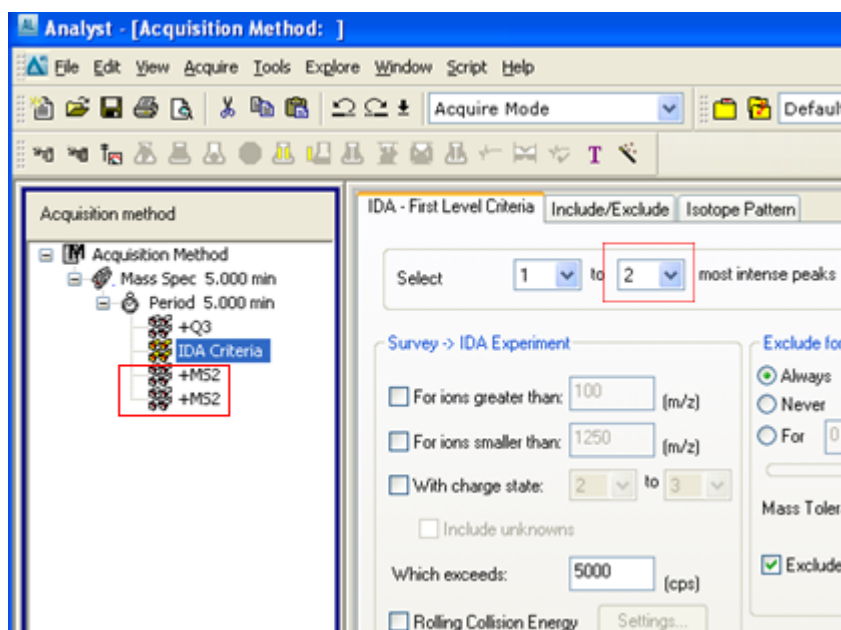
Crear un método IDA utilizando el editor del método de adquisición

Nota: Los experimentos deben introducirse en el orden en el que van a ejecutarse en bucle. Los experimentos no se pueden insertar entre experimentos existentes.

Sugerencia: Para reducir la necesidad de cambio de polaridad y minimizar el tiempo del ciclo, agrupe todos los experimentos dependientes positivos por un lado y los negativos por el otro dentro de un periodo.

1. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**.
2. Cree un nuevo método de adquisición con uno o dos análisis de estudio.
3. Seleccione el análisis de estudio y, a continuación, los parámetros adecuados.
4. Para utilizar un análisis de resolución mejorada a fin de confirmar el estado de carga o la selección de patrón de isótopos en un sistema QTRAP, haga lo siguiente:
 - En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**.
 - En la pestaña MS, en el menú desplegable **Scan type**, haga clic en **Enhanced Resolution (ER)**.
 - Especifique la información correspondiente para este tipo de análisis.
5. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add IDA Criteria Level**.
6. En los campos **Select X to Y most intense peaks**, establezca el rango de los picos de iones más intensos que el experimento IDA debe supervisar. En los IDA de un solo estudio, el número total de picos controlado debe ser igual al número de experimentos dependientes especificado. Para los IDA de dos estudios con cambios de polaridad en los análisis de estudio, el número de experimentos dependientes debe ser el doble del número total de picos que se van a supervisar, con la mitad en una polaridad y la otra en la polaridad contraria.

Figura 2-2: Ejemplo de método IDA con dos tipos de análisis dependientes y dos iones más intensos



7. Si se utiliza un análisis de resolución mejorada (ER), añada un marcador para cada pico supervisado.
En los marcadores de ER, escriba 1 en la ventana central (amu 0). Si se supervisan 4 picos, habrá 4 filas con los números 1, 2, 3 y 4 en la columna central. Para obtener más información, consulte la sección [Acerca de los marcadores](#).
8. Si se utiliza un análisis de ER para confirmar el estado de la carga, seleccionar el patrón de isótopos o recuperar la precisión de masa, seleccione la casilla de verificación **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** en la pestaña IDA - First Level Criteria.
9. Configure el resto de los parámetros de la pestaña IDA - First Level Criteria con los valores requeridos.
10. Si es necesario, en la pestaña Include/Exclude, modifique la lista adecuada para seleccionar las casillas de verificación **Include List** o **Exclude List** y, a continuación, especifique los iones objetivo o los iones por excluir.
11. Si es necesario, en la pestaña Include/Exclude, seleccione la casilla de verificación **Match Isotopes** y especifique el patrón de distribución isotópico con el que debe establecerse una coincidencia.
12. Para el primer experimento dependiente que se deba añadir (uno para cada pico supervisado por los criterios IDA de primer nivel), haga lo siguiente:
 - a. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**.
Se agregará un experimento debajo de los criterios IDA.
 - b. Especifique la información correspondiente para el análisis dependiente.

Sugerencia: Si va a utilizar más de un análisis dependiente, haga clic con el botón derecho en el análisis EPI y, a continuación, seleccione **Copy this experiment** hasta que se incluya el número correcto de análisis dependientes. Si se utiliza una copia en lugar de añadir un experimento, se copia la misma configuración a los nuevos análisis dependientes.

13. Abra el método.
14. Agregue los dispositivos y actualice todos los parámetros correspondientes.
15. Guarde el archivo del método de adquisición.

Crear un método IDA utilizando un análisis de algoritmo *Scheduled* MRM

En este ejemplo, se crea un método IDA que buscará el ion individual más intenso del tipo de análisis de estudio. El método de adquisición va a incluir un análisis de estudio y un análisis dependiente.

Para crear un método que incluya varios análisis dependientes, asegúrese de que el número de picos intensos coincida con el número de análisis dependientes indicado en la pestaña IDA Criteria (aplicable solo a IDA de un solo estudio). Por ejemplo, si el método contiene tres análisis dependientes, seleccione los picos más intensos del 1 al 3.

1. Creación de un experimento en *Scheduled* MRM. Consulte el documento *Tutorial del algoritmo Scheduled MRM*.

Nota: Cuando esté seleccionada la opción Target Cycle Time para usar en el experimento *Scheduled* MRM, el tiempo objetivo de ciclo solo se aplica al experimento de *Scheduled* MRM y no a todos los experimentos del método de adquisición IDA.

Sugerencia: Para añadir un tipo de análisis ER, hágalo antes de añadir los criterios IDA.

2. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add IDA Criteria Level**.
3. Especifique los parámetros de **IDA Criteria**.
4. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**.
5. En la pestaña MS, en el menú desplegable **Scan type**, seleccione un tipo de análisis dependiente. Para este ejemplo, seleccione **Product Ion (MS2)** o **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Nota: Para todos los tipos de análisis dependientes, el valor de **Product Of** debe ser 30 Da.

6. Especifique los parámetros del experimento.
 7. Guarde el método de adquisición en el proyecto en el que se vaya a ejecutar la adquisición.
-

Crear un método IDA utilizando dos análisis de algoritmo *Scheduled* MRM

En este ejemplo, cree un método IDA que busque los dos iones más intensos de los dos experimentos de análisis de estudio combinados. El método de adquisición del ejemplo cuenta con dos tipos de experimentos de análisis de estudio y cuatro experimentos de análisis dependiente.

Sugerencia: Si se cambia la polaridad durante los tipos de análisis de estudio, consulte la sección [Acerca del cambio de polaridad](#).

Nota: En el método de adquisición IDA de dos estudios, para los análisis de estudio también se pueden utilizar dos experimentos MRM o EMS (Enhanced MS).

1. Creación de un experimento en *Scheduled* MRM. Consulte los pasos del 1 al 7 de *Creación de un método de adquisición para el algoritmo Scheduled MRM* en el documento *Tutorial del algoritmo Scheduled MRM*.
2. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**. Se creará un segundo análisis de MRM. Establezca la polaridad contraria.
3. Seleccione la casilla de verificación **Enabled** en el grupo **Scheduled MRM** para crear otro experimento *Scheduled* MRM. Consulte el documento *Tutorial del algoritmo Scheduled MRM*.
4. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add IDA Criteria Level**.
5. Especifique los parámetros de **IDA Criteria**.
6. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**.
7. En la pestaña MS, en el menú desplegable **Scan type**, seleccione un tipo de análisis dependiente. Para este ejemplo, seleccione **Product Ion (MS2)** o **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Nota: Para todos los tipos de análisis dependientes, el valor de **Product Of** debe ser 30 Da.

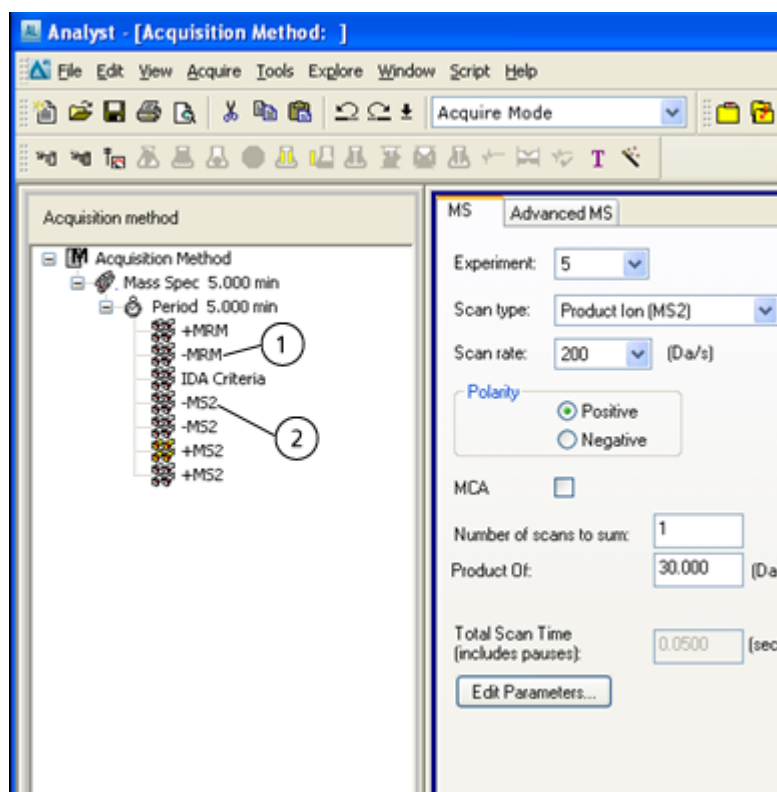
8. Especifique los parámetros del experimento.
9. Haga clic con el botón derecho del ratón en el experimento **MS2** o **EPI** y, a continuación, haga clic en **Copy this experiment**.
10. Repita el paso 9 dos veces. Asegúrese de que la polaridad se establezca tal como se describe en la sección [Acerca del cambio de polaridad](#).
11. Guarde el método de adquisición en el proyecto en el que se vaya a ejecutar la adquisición.

Acerca del cambio de polaridad

Si los análisis de inspección tienen polaridades diferentes, debe asegurarse de que configura el método de adquisición de la siguiente manera:

1. Asegúrese de que la polaridad del *primer* tipo de análisis dependiente es la misma que la del *último* tipo de análisis de estudio.

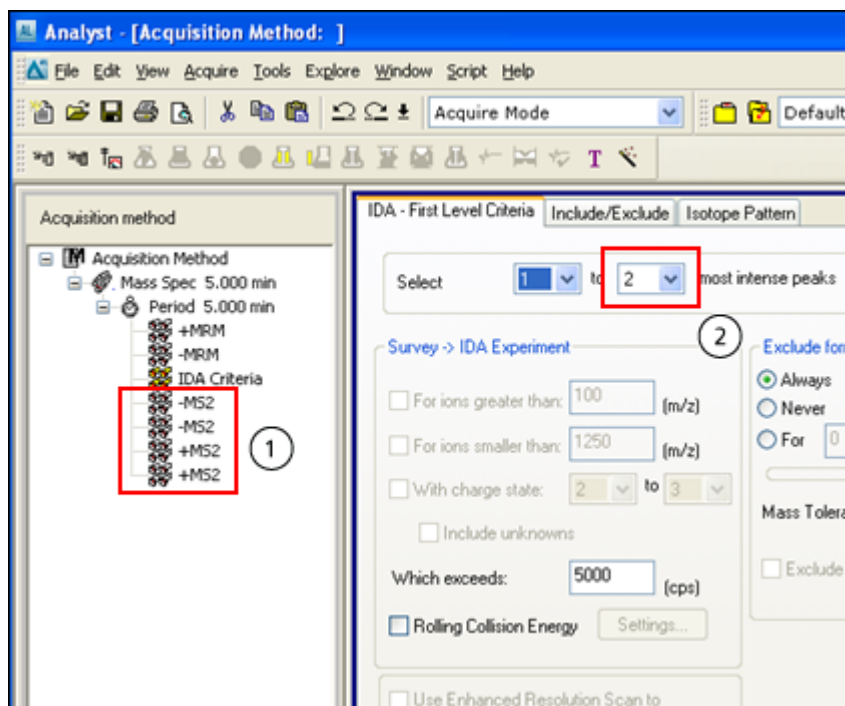
Figura 2-3: Ejemplo de tipos de análisis configurados para el cambio de polaridad



Elemento	Descripción
1	Último análisis de estudio
2	Primer análisis dependiente

2. Cree un método de adquisición en el que el número de análisis dependientes duplique el número de iones más intensos. Por ejemplo, para buscar los dos iones más intensos, incluya cuatro tipos de análisis dependientes.

Figura 2-4: Ejemplo de tipos de análisis dependientes y número de iones más intensos



Elemento	Descripción
1	Tipos de análisis dependientes (cuatro)
2	Iones más intensos (dos)

Nota: Los candidatos seleccionados solo se activan en los experimentos dependientes de la misma polaridad. Los análisis dependientes donde no haya asignado un candidato no se ejecutan en ese ciclo. Como máximo, en los ciclos se activan la mitad de los experimentos dependientes.

- Para cada experimento de análisis dependiente, asegúrese de que, si la polaridad es la misma que la del experimento anterior, el tiempo de estabilización sea cero.

Acerca de los marcadores

Los marcadores son números genéricos que se utilizan en los análisis y que se sustituirán por números específicos. El software sustituye el valor del marcador por un valor específico procedente del proceso de selección del método IDA. Los marcadores son esenciales para que los métodos IDA funcionen adecuadamente.

Cuando se seleccionan algunos experimentos por primera vez, los valores de marcador se agregan automáticamente:

- NL, Prec y EPI = 30
- MS/MS/MS

- Primer precursor = 30
- Segundo precursor = 10

ER también utiliza marcadores.

- En un método IDA, los marcadores comienzan en 1 en la primera fila. Cada fila consecutiva suma 1 hasta un máximo de 8 filas.
- Si se utiliza el asistente IDA Method Wizard, este añade automáticamente el número correcto de marcadores de ER.

Impacto del algoritmo *Scheduled* MRM Pro en IDA

Si se lleva a cabo un análisis de estudio de adquisición dependiente de información (IDA) mediante el algoritmo *Scheduled* MRM Pro, el análisis dependiente del método IDA se activa únicamente cuando las intensidades de todas las transiciones de MRM de un grupo se encuentran por encima de su umbral de disparo. Esto mejora el tiempo de ciclo mediante la eliminación de falsas activaciones de análisis dependientes.

Creación de un método de adquisición para el algoritmo IDA *Scheduled* MRM Pro

1. Cree un método de algoritmo *Scheduled* MRM Pro. Consulte el documento *Tutorial de Scheduled MRM*.
2. Si es necesario, añada un experimento de tipo de análisis ER antes de añadir un nivel de criterios IDA en el periodo.
3. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add IDA Criteria Level**.
4. Especifique los parámetros de los criterios IDA. Consulte la sección [Crear métodos IDA](#).
5. En el icono **Period**, haga clic con el botón secundario y seleccione **Add experiment**.
6. En la pestaña MS, en el menú desplegable **Scan type**, seleccione un tipo de análisis dependiente. Para este ejemplo, seleccione **Product Ion (MS2)** o **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Nota: Para todos los tipos de análisis dependientes, el valor de **Product Of** debe ser 30 Da.

7. Especifique los parámetros del experimento.
8. Guarde el método de adquisición en el proyecto en el que se vaya a ejecutar la adquisición.

Nota: Durante la adquisición de datos con un método del algoritmo IDA *Scheduled* MRM Pro, se utiliza el umbral de disparo para cada transición de MRM del método en lugar del umbral de IDA.

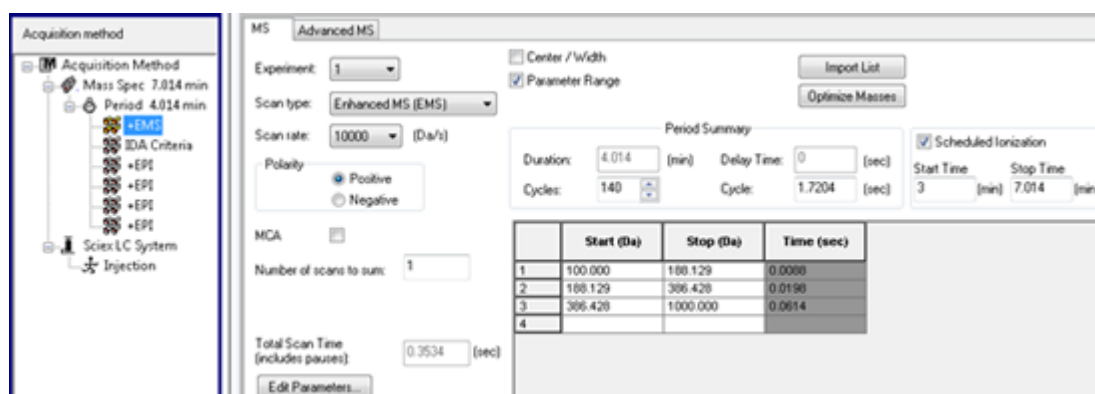
Crear un método IDA utilizando la ionización programada

1. Cree un método IDA manualmente en Method Editor o automáticamente utilizando el asistente **IDA Method Wizard**.
2. Seleccione cualquiera de los experimentos del método y, a continuación, seleccione la casilla de verificación **Scheduled Ionization**.
3. En el grupo **Scheduled Ionization**, escriba los valores apropiados para **Start Time** y **Stop Time**. Asegúrese de que los picos de interés se eluyan entre el **Start Time** y el **Stop Time**. Asegúrese también de que **Synchronization Mode** y la parte de LC del método de adquisición se establezcan de la misma manera que cuando no se utiliza **Scheduled Ionization**.

Nota: **Scheduled ionization** solo está disponible en métodos de adquisición de un solo periodo.

La figura muestra que se utiliza el **LC Synchronization Mode** y que el método de LC dura 10 minutos. Todos los picos de interés se eluyen una vez transcurridos 3 minutos y antes de que transcurran 7. Se aplicará un valor 0 de tensión de **IonSpray** antes del **Start Time** y después del **Stop Time**. La tensión de **IonSpray** establecida en el método solo se aplica entre el **Start Time** y el **Stop Time**. La función de **Scheduled Ionization** puede reducir el riesgo de contaminación del instrumento y, por lo tanto, reducir el tiempo de inactividad del espectrómetro de masas. Para obtener más información sobre **Scheduled Ionization**, consulte el documento *Guía para usuarios avanzados*.

Figura 2-5: Ionización programada



4. Guarde el método de adquisición.

Si los datos se van a adquirir con un método IDA, los datos no se abren en el visor de IDA hasta que la adquisición ha finalizado. No obstante, tampoco se abren en la ventana Explore durante la adquisición.

Para facilitar la visualización de los datos IDA, establezca IDA Explorer como visor predeterminado. Para seleccionar IDA Explorer de forma que se utilice para mostrar los datos IDA, utilice la pestaña IDA Explorer del cuadro de diálogo Appearance Options. El usuario también puede seleccionar las columnas del panel de vista de lista Mass-List. El IDA Explorer está preconfigurado para mostrar las muestras IDA.

Definir las opciones del IDA Explorer

1. Haga clic en **Tools > Settings > Appearance Options**. Se mostrará el cuadro de diálogo Appearance Options.
2. Haga clic en la pestaña IDA Explorer.
3. Seleccione la casilla **Use IDA Explorer to Display IDA Samples**.
4. En la sección **Column Options**, active las siguientes casillas según sea necesario:

Tabla 3-1: Column Options

Campo	Descripción
Intensity	(Intensidad) Muestra la intensidad de una relación m/z específica.
Molecular Weight (MW)	(Peso molecular [MW]) Muestra el peso molecular calculado de una relación m/z específica.
Scan	(Análisis) Muestra el tipo de análisis utilizado para una relación m/z específica.
Collision Energy (CE)	(Energía de colisión [CE]) Muestra la energía de colisión de una relación m/z específica.
Charge (Z)	(Carga [Z]) Muestra la carga de un ion específico.

5. En el caso de un sistema LIT, en la sección **LIT Column Options**, active las siguientes casillas según sea necesario:

Tabla 3-2: LIT Column Options

Campo	Descripción
Excitation Energy (AF2)	(Energía de excitación [AF2]) Muestra la energía de excitación del segundo ion precursor en los experimentos MS/MS/MS.
MS3 2nd Precursor (2nd Pre)	(2.º precursor de MS3 [2.º Pre]) Muestra el segundo ion precursor MS/MS/MS.

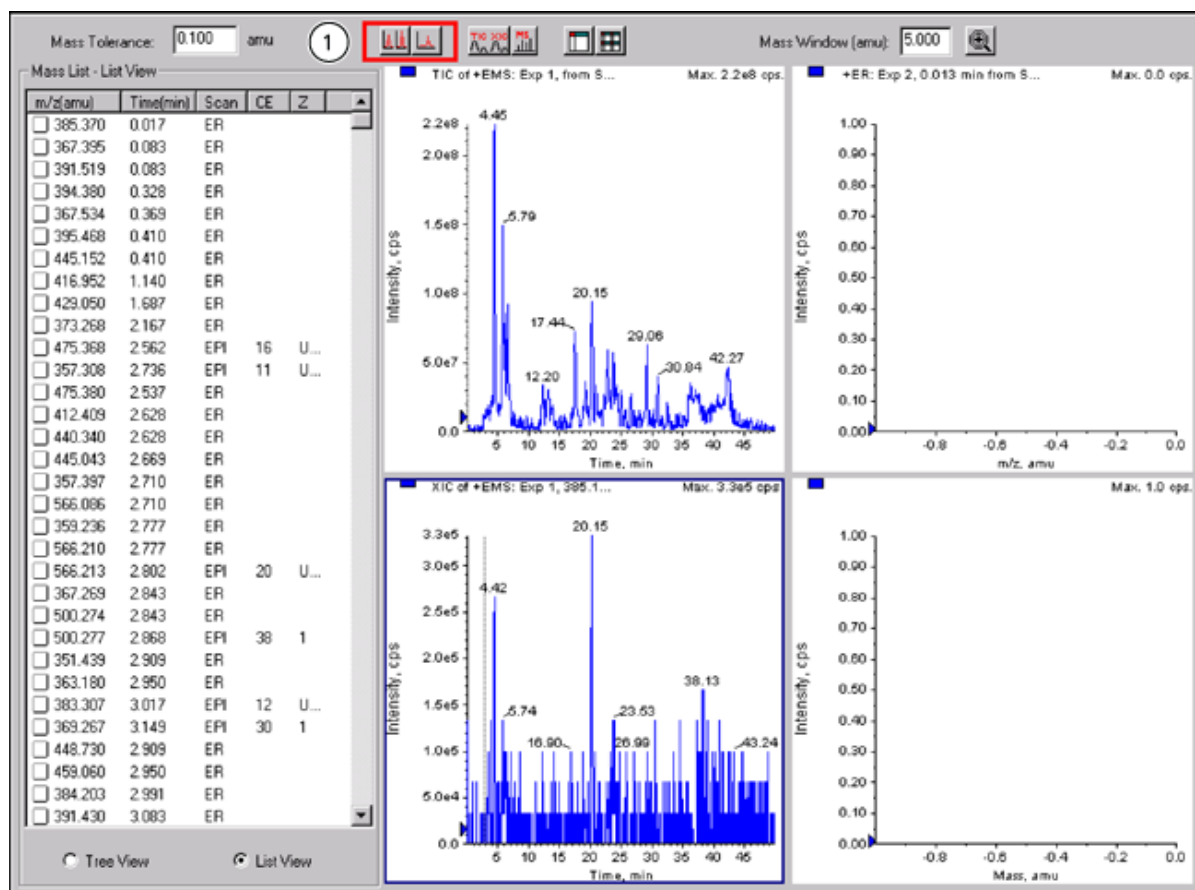
Tabla 3-2: LIT Column Options (continuación)

Campo	Descripción
DFT (Dynamic Fill Time)	(DFT [Tiempo dinámico de llenado]) Muestra el tiempo necesario para llenar el LIT.

Ver datos IDA

1. Asegúrese de que el proyecto Example esté seleccionado en el software Analyst MD.
2. En la barra Navigation, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File**. Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.
3. En el campo **Data Files**, haga doble clic en **LIT** y luego haga clic en **IDA BSA Digest.wiff**.
4. En el menú desplegable **Samples**, seleccione una muestra y haga clic en **OK**. Se abrirá el IDA Explorer. La sección izquierda del panel muestra la lista de masas enviada al análisis dependiente. Para cambiar de una vista a otra, seleccione **Tree View** o **List View** al final del panel Mass List. La sección derecha del panel contiene información gráfica sobre los datos IDA.

Figura 3-1: Botones de visualización de un solo gráfico y varios gráficos



5. Utilice los dos botones (elemento 1 en la figura) situados encima del gráfico para cambiar entre la vista de un solo gráfico y la vista de varios gráficos. Para ver únicamente el gráfico activo, haga clic en el botón que tiene un solo gráfico. Para volver a la vista de varios gráficos, haga clic en el botón que muestra dos gráficos..

Sugerencia: Para acceder a las funciones del modo **Explore** que no están disponibles en IDA Viewer, haga clic en **Export Active Graph to Explorer** y en **Export All Graphs to Explorer** en el panel situado encima de los gráficos para abrir los gráficos actuales en la ventana Explore.

Visualización de los datos IDA si el IDA Explorer no está activo

Si el IDA Explorer no está activo, los datos IDA se mostrarán en la ventana Explore. Para ver los datos IDA, haga doble clic en la flecha verde situada en la parte inferior del eje X.

Figura 3-2: TIC con todos los análisis (flecha de los datos IDA rodeada con un círculo)

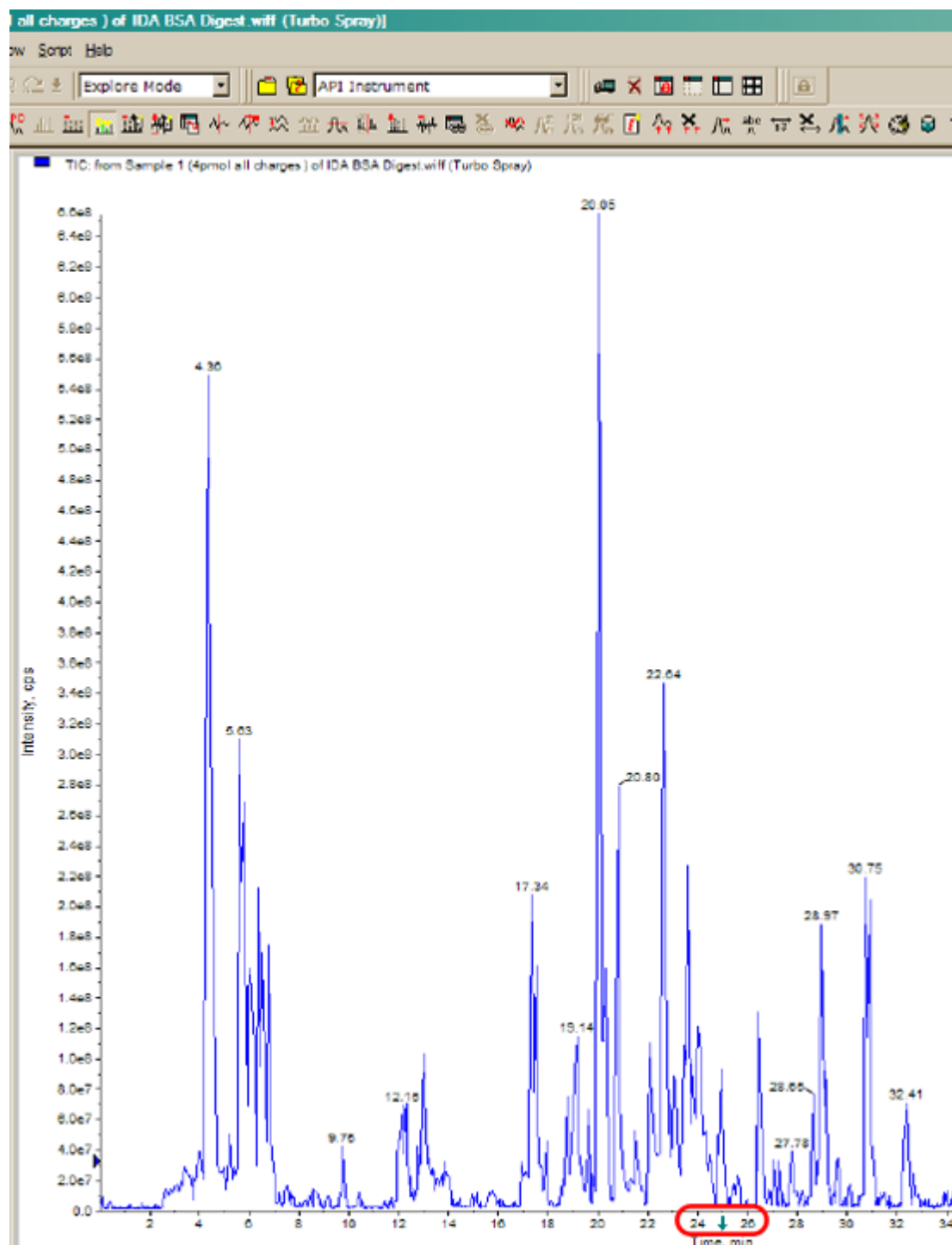
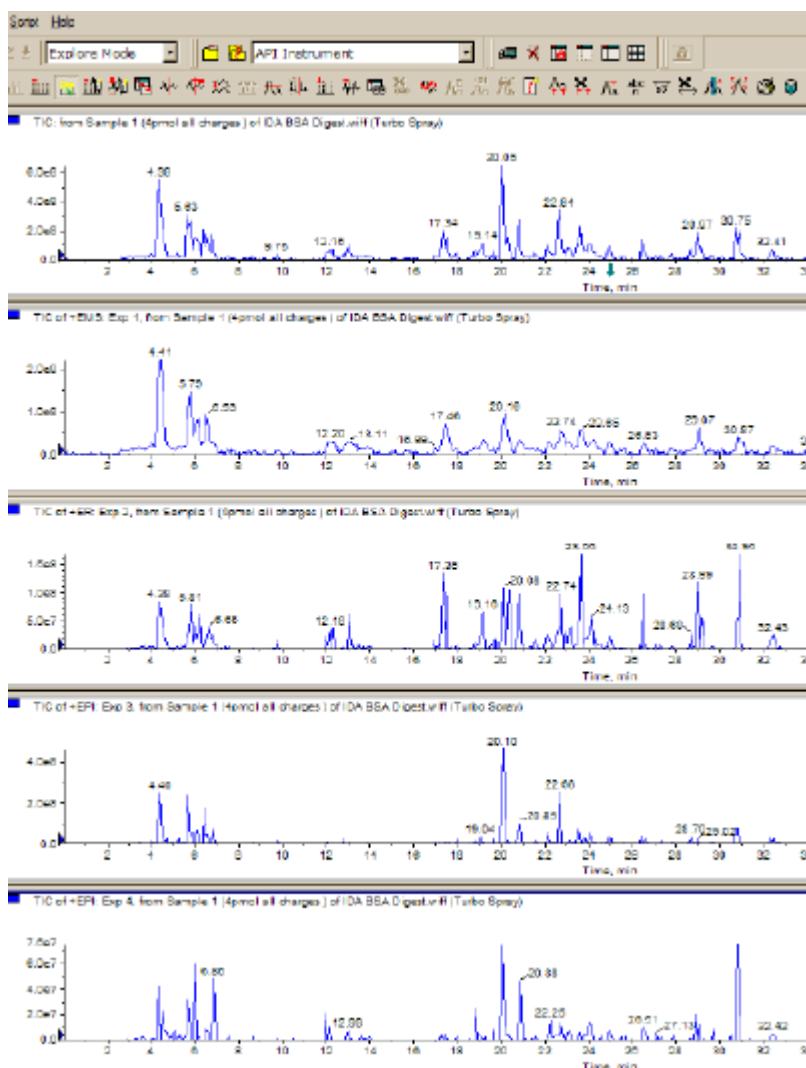


Figura 3-3: Análisis TIC individuales y acumulados



Acerca del algoritmo Dynamic Background Subtraction

El algoritmo Dynamic Background Subtraction (DBS) mejora la detección de los iones precursores en un experimento IDA. Cuando se activa el algoritmo DBS seleccionando la casilla de verificación **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** en la pestaña IDA– First Level Criteria, IDA utiliza un espectro al que se ha sustraído el fondo para seleccionar el ion de interés candidato para llevar a cabo 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 de LC, el algoritmo DBS permite la detección de especies a medida que aumenta la intensidad de sus señales, centrándose, por tanto, en la detección y análisis de los iones precursores en la sección creciente de los picos LC hasta la parte superior de estos (intensidad máxima).

Cuando se utiliza DBS en un método IDA con el algoritmo *Scheduled* MRM como análisis de estudio, la opción DBS no está disponible para los experimentos *Scheduled* MRM pero sí se utiliza para activar tanto las transiciones secundarias como los análisis dependientes.

Acerca del tiempo dinámico de llenado

DFT (tiempo dinámico de llenado) es una característica diseñada específicamente para optimizar los datos obtenidos en cada espectro para las funciones LIT. DFT ajusta de forma automática el tiempo utilizado para llenar el sistema LIT en función del flujo de iones procedente de la fuente.

En el caso de iones más intensos, el tiempo de llenado se reduce automáticamente con el fin de garantizar que el LIT no se llene en exceso con estos. En el caso de iones menos intensos, el tiempo de llenado se incrementa automáticamente con el fin de garantizar la idoneidad de las 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)

Los usuarios pueden ajustar la configuración de DFT seleccionando **Tools > Settings > Method Options** en el software Analyst MD.

Iconos

Tabla 3-3: Iconos de Acquisition Method Editor









Icono	Nombre	Descripción
	Espect. de masas	Haga clic para mostrar la pestaña MS en el editor de métodos de adquisición.
	Periodo	Haga clic con el botón secundario para agregar un experimento, agregar un IDA Criteria Level o eliminar el periodo.
	Procesador de muestras automático	Haga clic para abrir la pestaña Autosampler Properties.
	Bomba de jeringa	Haga clic para abrir la pestaña Syringe Pump Properties.
	Horno de columna	Haga clic para abrir la pestaña Column Oven Properties.
	Válvula	Haga clic para abrir la pestaña Valve Properties.
	DAD	Haga clic para abrir el DAD Method Editor.

Tabla 3-3: Iconos de Acquisition Method Editor (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	ADC	Haga clic para abrir la pestaña ADC Properties.

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.
