
Software Analyst MD

Guía del usuario de scripts



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.

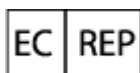
Rx only.

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



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

Tabla de contenido

Capítulo 1: Prólogo	5
Destinatarios	5
Asistencia técnica	5
Capítulo 2: Scripts	6
Instalar o desinstalar scripts	6
Instalar un script	6
Desinstalar un script	6
Crear métodos de cuantificación y archivos de texto	7
Usar el script Create Quan Methods From Text Files	7
Usar el script Create Text File from Quan Method	9
Formato de archivo de texto	10
Script DFT Tracker	14
Script MRM3 Optimization	15
Descripción general de la ventana MRM3 Optimization	15
Optimización en curso	20
Optimización completa	22
Descripción detallada de la lógica del script: Inicialización	24
Análisis de resolución mejorada	24
Análisis de ion múltiple Q1	24
Análisis de ion producto mejorado	24
Análisis de monitorización de reacciones múltiples	25
Análisis de MS/MS/MS (MS3)	25
Generar métodos finales	26
Script MSServiceLog	26
Instalación del script	26
Usar el script	27
Calculadora de sMRM	28
Instalación del script	29
Usar el script	29
Contacto	34
Formación del cliente	34
Centro de aprendizaje en línea	34
Soporte SCIEX	34
Ciberseguridad	34
Documentación	34

Destinatarios

Esta guía está dirigida a clientes y representantes del servicio técnico.

Asistencia técnica

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 sciex.com.

Este documento explica cómo instalar y utilizar Analyst MD. También proporciona una descripción general de los usos de cada script y cómo desinstalar un script cuando sea necesario.

Instalar o desinstalar scripts

Algunos scripts se instalan automáticamente cuando se instala el software Analyst MD.

El resto de los scripts están disponibles en la carpeta Scripts.

Los scripts deben instalarse para utilizarlos. Consulte la sección [Instalar un script](#).

Instalar un script

1. Realice una de las siguientes acciones:
 - Vaya a la carpeta `<Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts` del ordenador.
 - Vaya a la carpeta `Extras\Scripts` del DVD del software, si está disponible, o del paquete de descarga web del software descomprimido.
2. Abra la carpeta Scripts.
3. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para el script sMRM Calculator, haga doble clic en **sMRM Calculator Setup.exe**.
 - Para el resto de los scripts, haga doble clic en **ScriptRunner.exe**.
4. Siga las instrucciones en pantalla para instalar los scripts.
Los scripts instalados están disponibles en el menú **Script**.

Desinstalar un script

Nota: No desinstale los scripts DFTTracker y de optimización de MRM3. Si se eliminan esos scripts, el software Analyst MD debe volver a instalarse para acceder a ellos.

Para desinstalar el script, realice lo siguiente:

- Para los scripts Create Quan Methods From Text Files, Create Text File from Quant Method y MSServiceLog, vaya a la carpeta `<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts` y, a continuación, elimine el archivo dll del script manualmente.
- Para el script sMRM Calculator, realice lo siguiente:
 - En el sistema operativo Windows 7, haga clic en **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**.

- En el sistema operativo Windows 10, haga clic en **Start > Control Panel > Programs and Features**.
- Haga clic con el botón derecho del ratón en **sMRM Calculator** y seleccione **Uninstall**.
- Siga las instrucciones que se muestran en pantalla.

Crear métodos de cuantificación y archivos de texto

El script Create Text File From Quan Method exporta un método de cuantificación a un archivo de texto delimitado por tabulaciones. El script Create Quan Method From Text Files importa la información contenida en un archivo de texto delimitado por tabulaciones a un archivo de método de cuantificación (qmf). Actualmente, el componente Build Quantitation Method del software Analyst MD no admite esta funcionalidad.

El script Create Text File from Quan Method crea una representación en archivo de texto de un archivo de método de cuantificación. Se crea una columna para cada campo obligatorio en el archivo de texto si se selecciona la casilla de verificación **Export all columns**. Si no se selecciona dicha casilla, el script genera el archivo de texto únicamente con las columnas en las que el valor del campo no sea igual para todos los picos.

El script Create Quan Method From Text Files especifica los valores predeterminados para cualquiera de los campos no obligatorios del archivo de texto como el algoritmo de integración o los parámetros de regresión. Para obtener más información, consulte la sección [Formato de archivo de texto](#).

Usar el script Create Quan Methods From Text Files

1. Haga clic en **Script > Create Quan Methods From Text Files**.

Figura 2-1: Cuadro de diálogo Create Quantitation Methods from Text Files

Create Quantitation Methods from Text Files

Default Generic Parameters

Algorithm: **Analyst Classic (TurboChrom)**

Extraction Type: **MRM** Period: **1** Experiment: **1**

Expected RT: **0.1** min RT Window: **30** sec ☐ Use Relative RT

Bkg. Start (min): **0** Bkg. End (min): **0**

Conc. Units: Calc. Conc. Units:

Default Analyst Classic (TurboChrom) Parameters

Bunching Factor: **1** Noise Threshold: **100** Area Threshold: **200**

Num. Smooths: **0** Separation Width: **0.2** Separation Height: **0.01**

Exp. Peak Ratio: **5** Exp. Adjusted Ratio: **4** Exp. Valley Ratio: **3**

Default General IntelliQuan Parameters

Min. Peak Height: **0** cps

Min. Peak Width: **0** sec

Smoothing Width: **0** points

Default IntelliQuan MQ III Parameters

Noise Percent: **50** %

Base. Sub. Window: **1** min

Peak-Splitting Factor: **2**

☐ Report Largest Peak

Regression Parameters

Fit: **Linear**

Weighting: **None**

Parameter: **Area**

Iterate: **No**

Default Window Summation Parameters

☒ Use Baseline Subtraction

Create One Method **Cancel**

Create Multiple Methods

2. Utilice los parámetros de la sección Default Generic Parameters para crear un método de cuantificación. Los campos **Algorithm**, **Extraction Type**, **Period** y **Experiment** no están disponibles en el software Analyst MD. Configure los siguientes parámetros:
 - En la lista **Algorithm**, seleccione un algoritmo de búsqueda de picos. El algoritmo Window Summation suma todas las intensidades del umbral de retención y no buscará picos.
 - En la lista **Extraction Type**, seleccione el tipo de datos que se integrarán.
 - En las listas **Period** y **Experiment**, seleccione el número de periodos y el número de experimentos.

Los grupos Default Analyst Classic Parameters, Default General IntelliQuan Parameters, Default IntelliQuan MQ III Parameters y Default Window Summation Parameters contienen los parámetros que utiliza el algoritmo seleccionado en el campo **Algorithm**.

3. Seleccione la casilla de verificación **Use Baseline Subtraction** para que el algoritmo Window Summation sume las intensidades a la línea horizontal en la intensidad mínima de los puntos de datos dentro de la ventana de suma, en oposición a realizar la suma en la intensidad cero.

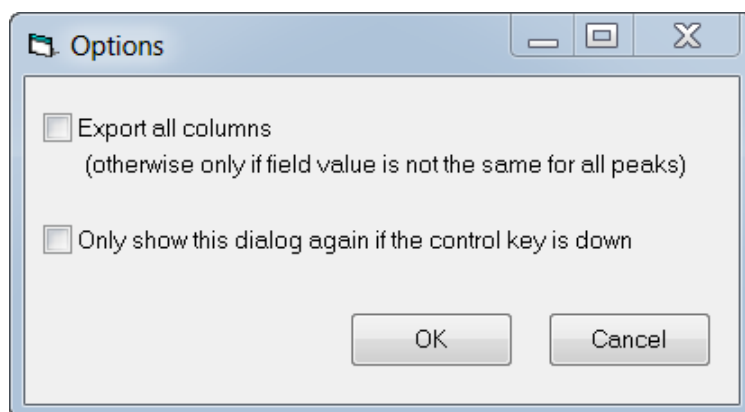
4. En la sección Regression Parameters, seleccione la información de regresión.
La información que se especifica aquí se aplica a todos los picos de analitos. A diferencia de los parámetros anteriores, no es posible indicar esta información en los archivos de texto. Por lo tanto, se aplican los mismos parámetros de regresión a todos los analitos. Para obtener una descripción completa sobre los parámetros, consulte el documento *Ayuda*.
5. Para crear un método de cuantificación, haga clic en **Create One Method**, vaya al archivo de texto que se utilizará para crear el método de cuantificación y, a continuación, haga clic en **Open**.
Se crea un archivo qmf de método de cuantificación con el mismo nombre de archivo que el archivo txt si el archivo de texto tiene el formato correcto y contiene las columnas necesarias. El método de cuantificación creado se almacena en la carpeta *Quantitation Methods* bajo el proyecto de trabajo actual en el software Analyst MD, independientemente de la ubicación del archivo de texto.
6. Para crear varios métodos a partir de varios archivos de texto, haga clic en **Create Multiple Methods**, vaya a la carpeta en la que se encuentran los archivos de texto y, por último, haga clic en **OK**.

Se crea un archivo qmf de método de cuantificación con el mismo nombre de archivo que el archivo txt para cada archivo de texto individual de esa carpeta si el archivo de texto tiene el formato correcto y contiene las columnas necesarias. Los métodos de cuantificación creados se almacenan en la carpeta *Quantitation Methods* bajo el proyecto de trabajo actual en el software Analyst MD, independientemente de la ubicación de los archivos de texto.

Usar el script Create Text File from Quan Method

1. Cree y guarde un método de cuantificación en el software Analyst MD.
2. Haga clic en **Script > Create Text File from Quan Method**.

Figura 2-2: Cuadro de diálogo Options



3. Seleccione la casilla **Export all columns** y, a continuación, haga clic en **OK**.
4. Acceda al archivo de método de cuantificación (qmf) y selecciónelo.
5. Vaya a la ubicación del archivo de texto y selecciónela.

El script genera el archivo de texto con todas las columnas. Si no se selecciona la casilla de verificación **Export all columns** en el paso 3, el script genera el archivo de texto únicamente con las columnas en las que el valor del campo no sea igual para todos los picos.

Formato de archivo de texto

Los archivos de texto empleados para crear los métodos de cuantificación (Create Quan Methods from Text Files) y los generados a partir de los métodos (Create Text File from Quan Method) están en el siguiente formato:

- Los diferentes campos se separan con tabulaciones y el final de cada línea con un retorno de carro o carácter de salto de línea.
- La primera línea del archivo debe contener los encabezados de columna. Todas las columnas que se muestran en la siguiente tabla marcadas como Required deben estar presentes. El resto de las columnas son opcionales. El orden real de las columnas no es relevante.
- Las líneas siguientes deben contener la información que se muestra en la tabla para un analito o un pico de patrón interno.

Tabla 2-1: Formatos de archivo de texto

Nombre de la columna	Obligatorio	Descripción
Peak Name	Sí	El nombre del pico del analito o patrón interno.
First Mass	Sí	Para datos de MRM, la masa Q1 del pico. Para los datos de análisis completo, la masa inicial que debe integrar el XIC. Para los datos Q1 MI o Q3 MI, la masa.
Second Mass	Quizá	Este campo es obligatorio cuando se integran datos de análisis completo o MRM. pero no lo es para datos de Q1 MI o Q3 MI. Para datos de MRM, esta es la masa Q3 del pico. Para los datos de análisis completo, es la masa final que debe integrar el XIC.
Extraction Type	No	El tipo de datos que se debe integrar. Si está presente, debe ser uno de los siguientes: 0: datos de MRM 1: datos de Q1 MI o Q3 MI 2: datos de análisis completo

Tabla 2-1: Formatos de archivo de texto (continuación)

Nombre de la columna	Obligatorio	Descripción
Is IS	No	Especifica si el pico actual es un patrón interno o un analito. TRUE si el pico es un patrón interno. Si no, FALSE. Si esta columna no está presente, se asume que todos los picos definidos son analitos. Nota: los picos de patrón interno se deben definir primero en el archivo de texto antes de cualquier otro pico de analito que utilice ese patrón interno (IS).
IS Name	No	Para los picos de analito, especifica el nombre del patrón interno correspondiente (si hay alguno). Si un analito no utiliza un patrón interno, deje el contenido de este campo vacío. Para los picos del patrón interno propiamente dicho, se ignora el contenido de este campo.
Period	No	El número de periodos para el pico (desde 1 al número de periodos en los datos).
Experimento	No	El número de experimentos para el pico (desde 1 al número máximo de experimentos en el periodo).
Utilizar RT relativa	No	Para los picos de analito que utilicen un patrón interno, especifica si el tiempo de retención esperado hace referencia o no al IS. TRUE si es así. Si no, FALSE. El contenido de este campo se ignora para los demás picos, pero aún así debe contener TRUE o FALSE.
Conc Units	No	Las unidades de concentración.
Calc Conc Units	No	Las unidades de concentración calculadas.
Bkg Start	No	Hora inicial, en minutos, para el fondo del pico. Este parámetro no afecta a la integración de picos de ninguna manera, aunque sí afecta a la forma en la que se calcula el ruido y, por tanto, la señal/ruido.
Bkg End	No	Hora final, en minutos, para el fondo del pico.
Expected RT	No	El tiempo de retención esperado, en minutos, de 0 a 1666.
RT Window	No	La ventana del tiempo de retención, en segundos, de 1 a 1000.

Tabla 2-1: Formatos de archivo de texto (continuación)

Nombre de la columna	Obligatorio	Descripción
Algoritmo	No	Especifica qué algoritmo de búsqueda de picos e integración se debe utilizar. Si está presente, debe ser uno de los siguientes: 0: Analyst Classic (TurboChrom) 1: IntelliQuan - IQA II (Automatic) 2: IntelliQuan - MQ III 3: Window Summation
Factor de agrupamiento	No	(Algoritmo TurboChrom) Factor de agrupación del pico, de 1 a 100.
Num Smooths	No	(Algoritmo TurboChrom) Número de suavizados, de 0 a 10.
Noise Threshold	No	(Algoritmo TurboChrom) Umbral de ruido, de 1-6 a 19.
Area Threshold	No	(Algoritmo TurboChrom) Umbral de área, de 1-6 a 112.
Separation Width	No	(Algoritmo TurboChrom) Anchura de separación, de 0 a 5.
Separation Height	No	(Algoritmo TurboChrom) Altura de separación, de 0 a 1.
Exp Peak Ratio	No	(Algoritmo TurboChrom) Proporción de picos exponencial, de 1 a 16.
Exp Adjusted Ratio	No	(Algoritmo TurboChrom) Proporción ajustada exponencial, de 2 a 16.
Exp Valley Ratio	No	(Algoritmo TurboChrom) Proporción de valle exponencial, de 1 a 16.
Min Height	No	Altura de pico mínima permitida, de 0 a 116, cuando se utiliza el algoritmo IntelliQuan.
Min Width	No	(Algoritmo IntelliQuan) Anchura de pico mínima permitida, de 0 a 116, en segundos.
Smooth Width	No	(Algoritmo IntelliQuan) Mitad de anchura del filtro de suavizado Savitzky-Golay, de 0 a 20.
MQ III Noise Percent	No	(Algoritmo IntelliQuan) Porcentaje de ruido cuando se utiliza MQ III. Debe ser un número entero entre 0 y 100.

Tabla 2-1: Formatos de archivo de texto (continuación)

Nombre de la columna	Obligatorio	Descripción
MQ III Baseline Sub Window	No	(Algoritmo IntelliQuan) Ventana de sustracción de línea de referencia, de 0 a 10 minutos, cuando se utiliza la opción MQ III.
MQ III Peak Splitting Factor	No	(Algoritmo IntelliQuan) Factor de división del pico, de 0 a 10, cuando se utiliza la opción MQ III.
MQ III Use Largest	No	(Algoritmo IntelliQuan) Especifica si se notifica el pico más grande cuando se utiliza la opción MQ III, dentro de la ventana de tiempo de retención, o el pico cuyo tiempo de retención es el más cercano al esperado. TRUE para usar el pico más grande o FALSE para usar el más cercano.
Summation Baseline Sub	No	(Algoritmo especial Window Summation) Especifica si el área se debe integrar en la línea de intensidad = 0 o en el valor de intensidad del punto de datos menos intenso dentro de la ventana. TRUE si el área se debe integrar en el valor de intensidad del punto de datos menos intenso, o FALSE si el área se debe integrar en la línea de intensidad = 0.

La siguiente tabla muestra un archivo de texto de ejemplo para los datos de análisis completo. El archivo de texto contiene tabulaciones entre las columnas y un retorno de carro al final de cada línea.

Tabla 2-2: Archivo de texto de ejemplo para datos de análisis completo

Peak Name	First Mass	Second Mass	Factor de agrupamiento
Analyte Peak 1	500,1	500,7	1
Analyte Peak 2	812	813	2
Tipos de Peak 3	400	401	3

La siguiente tabla muestra otro ejemplo de datos de MRM. El pico de analito 1 está configurado para usar el patrón interno especificado y el pico de analito 2 no utiliza un patrón interno.

Tabla 2-3: Archivo de texto de ejemplo para datos de MRM

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
IS Peak 1	TRUE	—	500,1	413,2
Analyte Peak 1	FALSE	IS Peak 1	600,2	382,1

Scripts

Tabla 2-3: Archivo de texto de ejemplo para datos de MRM (continuación)

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 2	FALSE	IS Peak 1	400	312,1

La siguiente tabla contiene una mezcla de datos de análisis completo y MRM en diferentes experimentos:

Tabla 2-4: Archivo de texto de ejemplo para datos de MRM

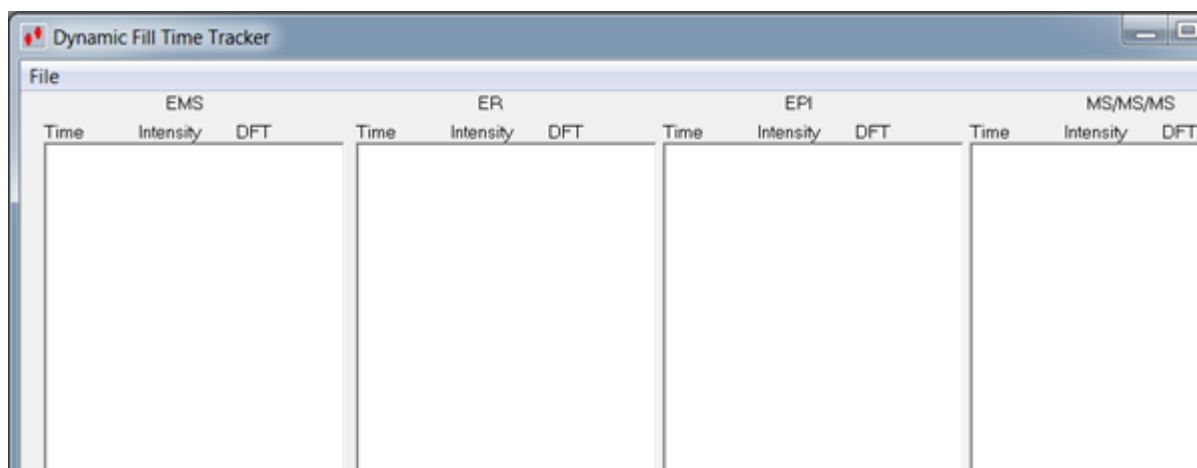
Peak Name	Tipo de extracción	Experimento	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 1	0	1	500,1	413,2
Analyte Peak 2	0	1	600,2	382,1
Analyte Peak 3	2	2	812	813
Analyte Peak 4	2	2	400	401

Script DFT Tracker

El script Dynamic Fill Time (DFT) Tracker realiza un seguimiento de la configuración de DFT utilizada durante los análisis del espectrómetro de masas QTRAP. Utilice el script para determinar el tiempo de llenado óptimo para el modo de trampa lineal de iones (LIT), para obtener una gran calidad de datos en un rango dinámico amplio. DFT Tracker supervisa los siguientes tipos de análisis de LIT: Espectrometría de masas mejorada (EMS), Resolución mejorada (ER), Ion producto mejorado (EPI) y MS/MS/MS (MS3).

- Haga clic en **Script > DFTTracker**.

Figura 2-3: Cuadro de diálogo Dynamic Fill Time Tracker



DFT Tracker supervisa los cambios dinámicos que se producen en el tiempo de llenado durante un procesamiento en tiempo real.

El sistema calcula dinámicamente el tiempo necesario para rellenar la trampa lineal de iones. En compuestos abundantes, un tiempo de llenado corto reduce los efectos de carga de espacio al limitar el número de iones en la trampa de iones. Un tiempo de llenado más prolongado aumenta las señales débiles al permitir que se acumulen los iones.

- Haga clic en **File > Save** para guardar el tiempo de llenado objeto de seguimiento.
- Haga clic en **File > Clear** para borrar el tiempo de llenado objeto de seguimiento.
- Haga clic en **File > Always On Top** para mantener la ventana Dynamic Fill Time Tracker siempre encima de todas las demás ventanas y aplicaciones abiertas.
- Haga clic en **File > Exit** para salir el script DFT Tracker.

Script MRM3 Optimization

Utilice este script para el análisis de cuantificación en los sistemas QTRAP con el fin de proporcionar mayor especificidad y, por lo tanto, una detección mejorada al cuantificar analitos en matrices complejas. Este script se ha diseñado para generar un método de adquisición MS3 óptimo mediante infusión. El script realiza los siguientes pasos de optimización:

- Confirmar la masa del ion precursor
- Optimizar la transmisión a la celda de colisión
- Determinar los iones de fragmentación principales
- Optimizar la energía de colisión (CE) para cada ion de fragmentación
- Realizar análisis MS3 en cada ion de fragmentación
- Optimizar la energía de excitación (AF2) para todos los análisis MS3
- Generar un informe
- Guardar todos los datos y métodos de adquisición

El script también se puede utilizar en aplicaciones cualitativas, para generar colecciones de espectros MS/MS y MS3 para compuestos de un modo semiautomático (es decir, compuesto por compuesto).

Descripción general de la ventana MRM3 Optimization

Utilice los controles de la ventana MRM3 Optimization para desplazarse por ella. En la ventana también se muestran los resultados de optimización conforme se van generando. A continuación se muestra una descripción general de las diversas secciones de esta ventana.

Tabla 2-5: Ventana de optimización MRM3

Campo	Descripción
Status Window	Cuando se inicia el script por primera vez, en esta ventana se muestra la configuración de optimización actual que se utilizará para la optimización. Cuando se inicie la optimización, esta ventana mostrará información de espectros.

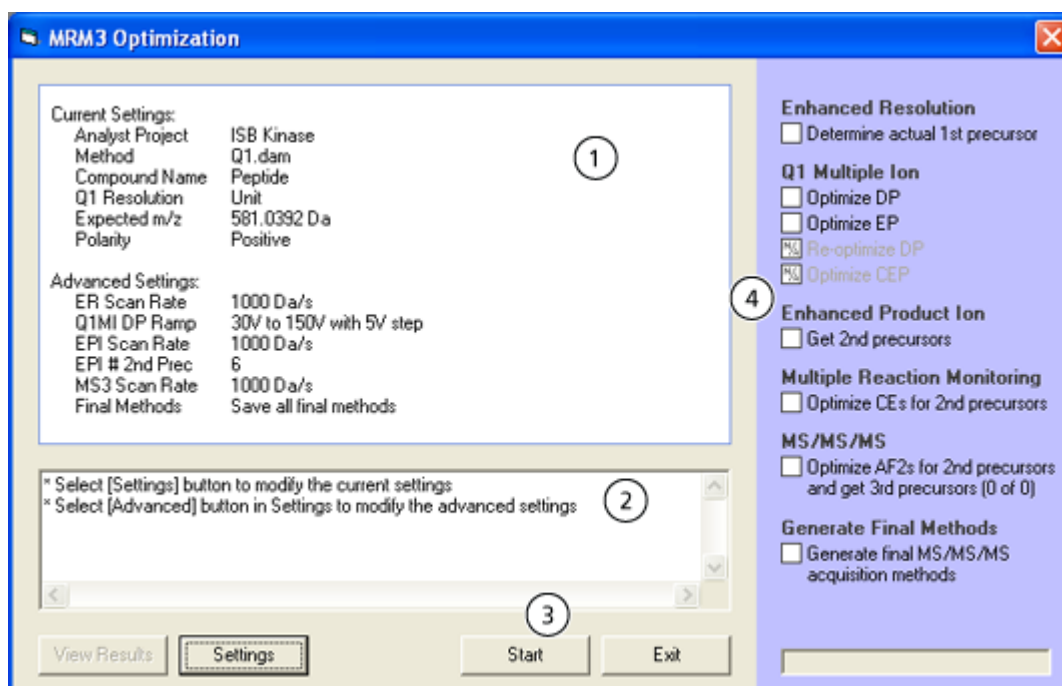
Scripts

Tabla 2-5: Ventana de optimización MRM3 (continuación)

Campo	Descripción
Log File	Muestra los resultados detectados durante la optimización en formato de texto. Cada entrada de esta sección también se agrega al archivo Log.txt generado.
Overall Progress	Muestra el progreso de optimización general.
Main Controls	Esta sección contiene todas las funciones principales asociadas a la configuración y ejecución del proceso de optimización.

- Haga clic en **View Results** para abrir y consultar el archivo en el Bloc de notas de Microsoft. Tras completarse la optimización, el sistema genera y guarda automáticamente un archivo Results.txt.
- Haga clic en **Settings** para abrir una ventana en la que podrá escribir la información de los compuestos necesaria para el proceso de optimización.
- Haga clic en **Start** para iniciar el proceso de optimización. Durante la optimización, el nombre de este botón será **Abort** y podrá hacer clic en él para detener el proceso de optimización.

Figura 2-4: Ventana de optimización MRM3



Elemento	Descripción
1	Panel de estado

Elemento	Descripción
2	Archivo de registro
3	Controles principales
4	Progreso general

Configuración de preferencias

El cuadro de diálogo Settings se abre automáticamente cada vez que se inicia el script.

1. Haga clic en **Browse** para acceder al método de adquisición de inicio. Este método contiene las condiciones de la fuente que se utilizarán para la optimización.
2. En el campo **Compound Name**, escriba un nombre de compuesto descriptivo. Este nombre se utilizará como prefijo para todos los métodos de adquisición y archivos de datos generados.
3. En el campo **Expected m/z (amu)**, escriba la relación masa-carga prevista (m/z) del compuesto. Si se desconocen los valores de la relación m/z del compuesto, haga clic en **Calculate from chemical formula** para calcularla a partir de la fórmula química del compuesto. Consulte la sección [Cálculo de \$m/z\$](#) .
4. En el campo **Q1 Resolution**, seleccione la resolución Q1 que se utilizará para MS/MS y MS3.
5. En el grupo **Polarity**, haga clic en una polaridad, que puede diferir del método Starter. La opción **Do both** no se admite actualmente.
6. Para modificar parte de la configuración utilizada por el proceso de optimización, haga clic en **Advanced**. Consulte la sección [Uso del cuadro de diálogo Advanced Settings](#).
7. Para verificar y utilizar la configuración actualizada, haga clic en **OK**.

Usar el script

1. Genere un método de adquisición Starter si aún no existe ninguno. El método Starter debe ser un método de adquisición Q1 creado en Manual Tune y debe contener las condiciones de la fuente requeridas para el proceso de ajuste, ya que estas no las optimiza el script.
2. Guarde el método en la carpeta `Acquisition Methods` del proyecto adecuado, donde se guardarán todos los archivos generados.
3. Haga clic en **Script > MRM3 Optimization**.

Figura 2-5: Cuadro de diálogo Settings

Settings

Acquisition Method:

C:\Analyst Data\Projects\Example\Acquisition Methods\

Compound Name:

Expected m/z (Da):

Q1 Resolution:

Polarity

☒ Positive

☐ Negative

☐ Do both

4. Introduzca la información de compuesto requerida para el proceso de optimización y, a continuación, haga clic en **OK** en el cuadro de diálogo Settings.
5. Para iniciar el proceso de optimización, haga clic en **Start** en la ventana MRM3 Optimization.

Cálculo de m/z

Utilice el cuadro de diálogo Settings para acceder a la calculadora de m/z .

1. En la ventana MRM3 Optimization, haga clic en **Settings**.
Se abre el cuadro de diálogo Settings.
2. Haga clic en **Calculate from chemical formula**.

Figura 2-6: Cuadro de diálogo Calculate m/z

Calculate m/z

Enter a formula (i.e. C₆H₆) and charge:

Chemical Formula:

Num of charges:

Calculated m/z :

3. En el campo **Chemical Formula**, escriba la fórmula química del compuesto. Utilice letras mayúsculas para los elementos. La fórmula química para péptidos también se introduce en este cuadro de diálogo.
4. En el campo **Num of charges**, haga clic en el número de cargas.
5. Para calcular el valor de m/z para la fórmula química y la carga introducida, haga clic en **Calculate**.
6. Para cerrar la calculadora y actualizar el campo **Expected m/z (amu)** del cuadro de diálogo Settings con el valor de m/z calculado, haga clic en **Use m/z** .

Uso del cuadro de diálogo Advanced Settings

En este cuadro de diálogo, se facilita una descripción de cada uno de los pasos de optimización. Algunos de los valores se pueden modificar para personalizar la optimización.

1. En la ventana MRM3 Optimization, haga clic en **Settings**. Se abre el cuadro de diálogo Settings.
2. Haga clic en **Advanced**.

Figura 2-7: Cuadro de diálogo Advanced Settings

Advanced Settings

Enhanced Resolution
Finds the most intense peak within a 2 Da window of expected 1st precursor molecular weight. Mass range window defaulted to 30 Da around expected mass to charge ratio.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
Cycles: 20

Q1 Multiple Ion
Optimizes DP and EP. DP re-optimized if $-10 < EP < 10$. CEP is optimized only when applicable. Smooths TIC 2 times and finds voltage yielding greatest ion count.
DP Ramp: Start 30, Stop 150, Step 5 (0-200V)
Dwell Time: 100 (ms)

Enhanced Product Ion
Finds the most intense 2nd precursor peaks, excluding any peaks within a 5 Da window of 1st precursor.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
2nd Precursors: 6 (1-10)
Mass range: 300 to 1000
CE: 30 CES: 10
Cycles: 3

Multiple Reaction Monitoring
Optimizes CE values for the most intense 2nd precursor peaks by cycling through each XIC overlay. XIC graph smoothed 2 times and voltage yielding greatest ion count is determined. (CE is ramped for its entire range with a 2V step size)
Dwell Time: 50 (ms)

MS/MS/MS
XIC graph smoothed 2 times. Finds 2 most intense 3rd precursors at 5% max intensity. Exclude peaks within 2 Da window of 2nd precursor (parent must be $< 10\%$ total ion count). (AF2 is ramped for optimal sensitivity.)
Scan Rate: 1000 (Da/s)
☒ Use Q0 Trapping
Fixed Fill Time: 50 (ms)
Mass range: 100 to 1000

Generate Final Methods
Creates final MS/MS/MS methods with mass range of 50 Da to 2nd precursor + 0.8 Da for each top 2nd precursor. Creates optimal MS/MS/MS method with 20 Da mass range window around most intense 3rd precursor.
☒ Save All Final Methods
☐ Save Optimal Method Only

OK Cancel

3. En los campos **Scan Rate** de los grupos Enhanced Resolution, Enhanced Product Ion y MS/MS/MS, seleccione la velocidad de análisis para **ER**, **EPI** y **MS3**.
4. En el grupo **Q1 Multiple Ion**, en los campos **DP Ramp**, indique el rango de potencial de desagrupación (DP) para la optimización. El rango se expresa en valores absolutos y la

polaridad adecuada se aplica automáticamente en función de la selección realizada en el cuadro de diálogo Settings.

5. En el grupo **Enhanced Product Ion**, realice lo siguiente:
 - En el campo **2nd Precursors**, indique el número máximo de segundos precursores (iones de fragmentación) utilizados para la optimización de MS3. Escriba un número entre 1 y 10.
 - En el campo **Mass range**, escriba el rango de masas de los segundos precursores que se seleccionarán para la optimización de MS3.
 - En el campo **CE**, escriba el valor de energía de colisión y, en el campo **CES**, escriba el valor de dispersión de energías de colisión que proporcione un buen espectro de MS/MS del que se puedan seleccionar iones de fragmentación.
6. Para generar todos los métodos de MS3 finales de cada segundo precursor y el método de MS3 óptimo para el análisis de cuantificación, en el grupo **Generate Final Methods**, haga clic en **Save All Final Methods**. Haga clic en **Save Optimal Method Only** para guardar únicamente el método de MS3 óptimo (el más sensible para la cuantificación).
7. Haga clic en **OK** para aceptar la configuración avanzada actualizada.

Optimización en curso

Cuando se inicia la optimización, la función de ajuste manual del software Analyst MD se detiene automáticamente. Durante la ejecución del script, se pueden seguir utilizando todas las funciones del software. También se actualiza un archivo Log.txt conforme finalice cada parte del procedimiento de optimización. Para detener el script en cualquier momento, haga clic en **Abort**. Consulte las figuras siguientes para ver ejemplos del script. En la sección Overall Progress, las imágenes de la lista de comprobación y las fuentes de texto representan los diferentes estados, que se describen en la siguiente sección.

Figura 2-8: Ejemplos de estado

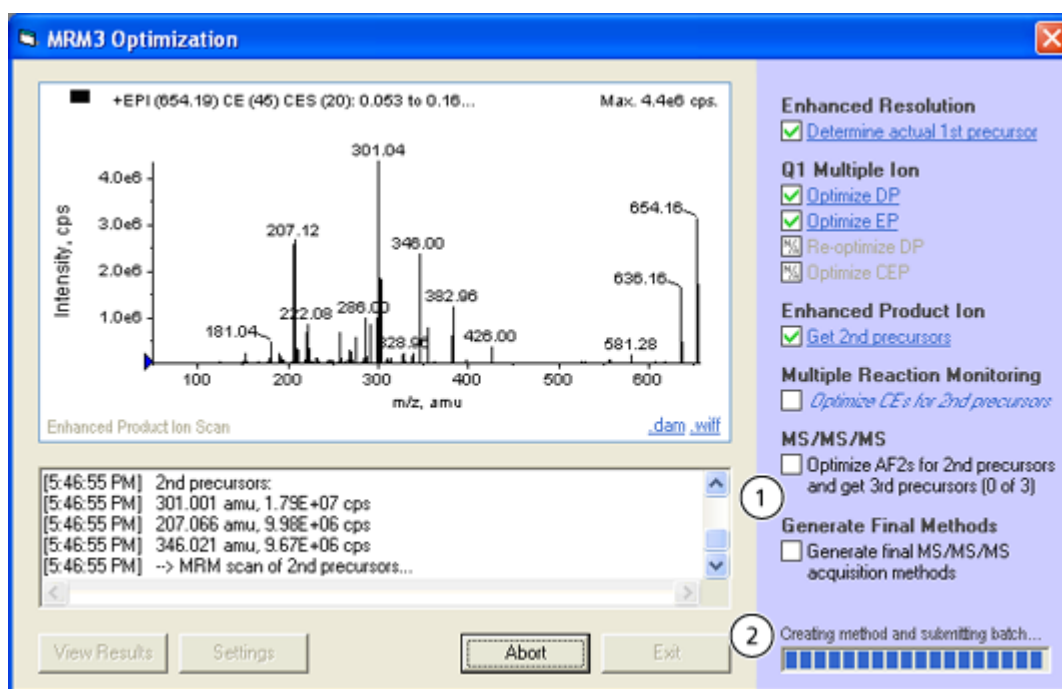
- ❑ ① Task not performed yet – text is black
- ② *Task in progress* – text is blue and italic
- 📄 ③ Task will not be performed – text is grey
- ✅ ④ Task completed (hyperlink) – text is blue and underlined
- ⑤ Task completed (no link) – text is blue
- ⑥ *Part of task completed (hyperlink)* – text is blue, underlined, and italic

Elemento	Descripción
1	Tareas que no se han realizado aún: el texto es de color negro.
2	Tarea en curso: el texto es de color azul y está en cursiva.
3	Tarea que no se va a realizar: el texto es de color azul y está subrayado.
4	Tarea completada (hipervínculo): el texto es de color azul y está subrayado.

Elemento	Descripción
5	Tarea completada (vínculo): el texto es de color azul.
6	Tarea completada parcialmente (hipervínculo): el texto es de color azul y está subrayado y en cursiva.

Si el texto está subrayado, haga clic en él igual que lo haría en un hipervínculo de página web y se mostrará el espectro o cromatograma correspondiente. El texto que aparece bajo MS/MS/MS también muestra el número de análisis de MS3 que se está realizando, ya que es posible tener entre 1 y 10 análisis. La sección Overall Progress también incluye un área Message. En esta área, una barra de progreso muestra el progreso del paso en curso. Sobre la barra de progreso, se muestran varios mensajes, como el tiempo y otros estados del paso de optimización actual.

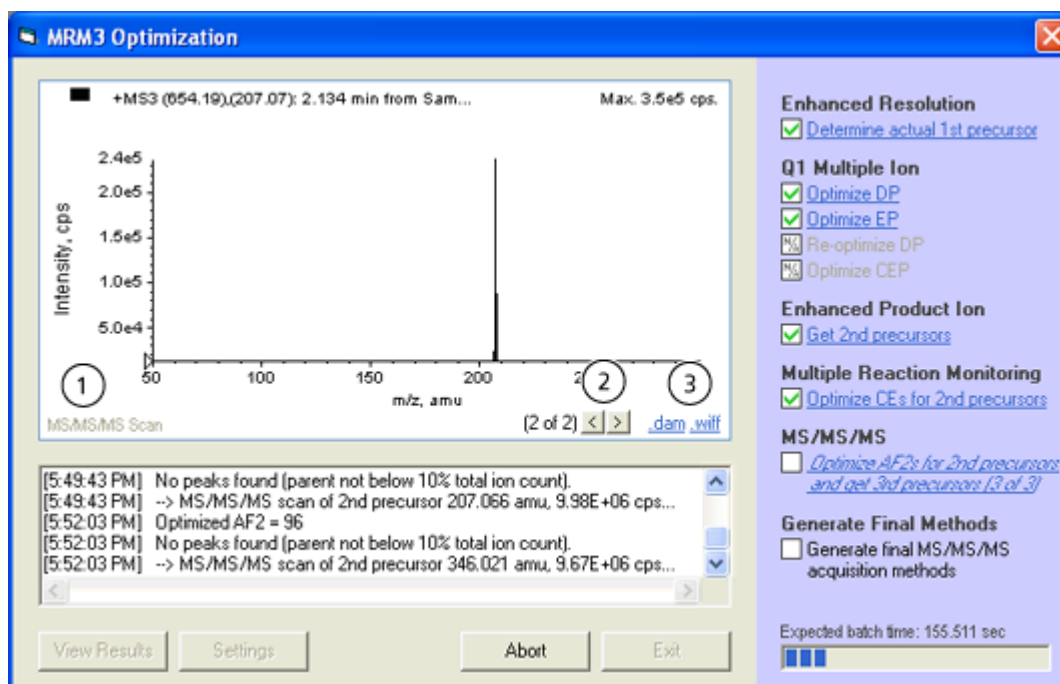
Figura 2-9: Ventana de optimización MRM3 tras un análisis EPI



Elemento	Descripción
1	Lista de comprobación
2	Mensaje

En la ventana de estado de espectro, se muestra el espectro o cromatograma generado previamente. Cuando se selecciona uno de los elementos de la lista de comprobación, se muestra el gráfico correspondiente. El nombre del tipo de análisis indica qué análisis se está mostrando en ese momento. Para cada paso completado, es posible abrir el método de adquisición (dam) o el archivo de datos (wiff) asociado al gráfico mostrado. Si se muestra un análisis MS/MS/MS, utilice los botones para desplazarse por los diferentes análisis MS3.

Figura 2-10: Ventana de optimización MRM3 durante un análisis MS3



Elemento	Descripción
1	Tipo de análisis
2	Botones para desplazarse por los diferentes análisis MS3
3	Vínculos

Optimización completa

Cuando se completa o se detiene la optimización cuantitativa para MS3, se genera un archivo Results.txt. Este archivo se abre automáticamente en el Bloc de notas de Microsoft. Haga clic en **View Results** en la ventana MRM3 Optimization para ver el archivo. A continuación se describen las distintas partes del archivo Results.txt.

- **Hora y duración:** muestra la fecha y hora y la duración de la optimización.
- **Condiciones iniciales definidas por el usuario:** muestra la configuración y la configuración avanzada de esta sección.
- **Condiciones de optimización detectadas:** muestra las condiciones óptimas detectadas durante los análisis ER y Q1MI.
- **Fragmentos de MS3 detectados y pérdidas asociadas:** muestra los fragmentos y las condiciones óptimas (energía de colisión y la energía de excitación), así como las pérdidas asociadas detectadas para el análisis EPI y MS3.

Figura 2-11: Informe de optimización

```

Results.txt - Notepad
File Edit Format View Help
Quantitative Optimization for MS3
Thursday, July 15, 2004 (Start 10:12:49 AM, End 10:24:37 AM) 1

Starting Parameters
=====
Analyst Project: Opt MS3
Starting Method: Starter Method.dam
Compound Name: Reserpine
Resolution: Unit
Expected m/z: 609.281 amu 2
Polarity: Positive

ER Scan Rate: 250 amu/s
Q1MI DP Ramp: 0V to 200V with 5V step
EPI Scan Rate: 1000 amu/s
EPI # 2nd Prec: 5
MS3 Scan Rate: 1000 amu/s
Final Methods: Save all final methods

Optimization Results
===== 3
Actual m/z: 609.172 amu, 7.23E+07 cps
Optimized DP: 90 (30 initial value)
Optimized EP: 10 (10 initial value)
Optimized CEP: 24 (24.774 initial value)

[MS/MS Fragment 1] 195.117 amu (Loss of 414), 9.98E+06 cps 4
Optimized CE: 47 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          167.04             28       5.00E+04
2          152.82             42       1.67E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_195.117.dam

[MS/MS Fragment 2] 174.149 amu (Loss of 435), 8.60E+06 cps
Optimized CE: 55 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          159.05             15       1.00E+05
2          142.209            32       5.00E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_174.149.dam

```

Elemento	Descripción
1	Tiempo y duración
2	Condiciones iniciales definidas por el usuario
3	Condiciones de optimización detectadas
4	Fragmentos de MS3 detectados y pérdidas asociadas

Todos los métodos de adquisición generados tienen un nombre de archivo descriptivo con el formato [nombre de compuesto proporcionado] + [tipo de análisis] + [m/z] + dam. Estos métodos se guardan en la misma carpeta que el método de adquisición inicial.

Todos los archivos de datos y los archivos Log.txt y Results.txt se guardan en una subcarpeta Data que se crea en el mismo proyecto que el método de adquisición de inicio. La subcarpeta tiene el formato [nombre de compuesto proporcionado] + OptMS3 + ([fecha], [hora]). Los archivos de datos tienen el formato [nombre de compuesto proporcionado] + [tipo de análisis] + [m/z] + wiff.

Descripción detallada de la lógica del script: Inicialización

En esta sección se describe cada fase del proceso de optimización. Todos los análisis se realizan con el número de análisis que se sumarán definido en 3.

Antes de realizar un análisis de optimización, el script MRM3 Optimization lleva a cabo los siguientes pasos de inicialización. Si se produce un error durante alguno de estos pasos, el script detiene el proceso de optimización.

1. Asegúrese de que se esté ejecutando el software Analyst MD.
2. Cargue el método de adquisición inicial para ver si este es válido y compruebe el tipo de dispositivo.
3. Cree una nueva subcarpeta `Data` para almacenar los archivos wiff.
4. Cree el archivo Log.txt.

Análisis de resolución mejorada

Este paso confirma la masa del ion utilizado para la optimización. El análisis de ER se realiza durante 20 ciclos a la velocidad de análisis especificada. A continuación, se selecciona el pico más intenso en ± 1 amu del valor de m/z previsto del primer precursor. Como sucede en el software Analyst MD, este análisis se realiza con un rango de masas de 30 amu en torno al valor de m/z especificado. En el caso de las especies con carga múltiple, el ion C12 se determina en este paso.

Análisis de ion múltiple Q1

Este paso optimiza la transmisión del ion de interés a la celda de colisión. Esto se realiza mediante un análisis Q1 MI. El script optimiza primero el parámetro DP, realizando el análisis en la rampa de DP especificada. Optimice el parámetro EP; para hacerlo, elévelo de 1 V a 12 V (de -12 V a -1 V en el modo negativo), con incrementos de 0,5 V. Si el EP óptimo es inferior a 10 V (superior a -10 V en el modo negativo), el parámetro DP se vuelve a optimizar. El parámetro CEP también se optimiza elevándolo de 0 a 100 V (de -100 V a 0 V en el modo negativo), con incrementos de 2 V. Para determinar la tensión óptima, los gráficos se suavizan dos veces y se utiliza la tensión que contiene el mayor recuento de iones. El tiempo de permanencia para cada análisis se define en 100 ms.

Análisis de ion producto mejorado

Este paso selecciona los iones de fragmentación que se utilizarán para la optimización de MS3. Esto se realiza mediante el uso de un análisis de EPI durante tres ciclos a la velocidad de análisis seleccionada. Especifique un CE óptimo para el compuesto que se va a analizar. Si se desconoce el CE óptimo, especifique un valor de CES para que se utilice un rango de valores de CE. A continuación, se detectan los picos de segundo precursor más

intensos, excluyendo los picos en la ventana de $\pm 2,5$ amu del primer precursor. El número de segundos precursores que se utilizará se selecciona en la configuración avanzada. El rango de masas del que se seleccionan los segundos precursores lo especifica el usuario.

Análisis de monitorización de reacciones múltiples

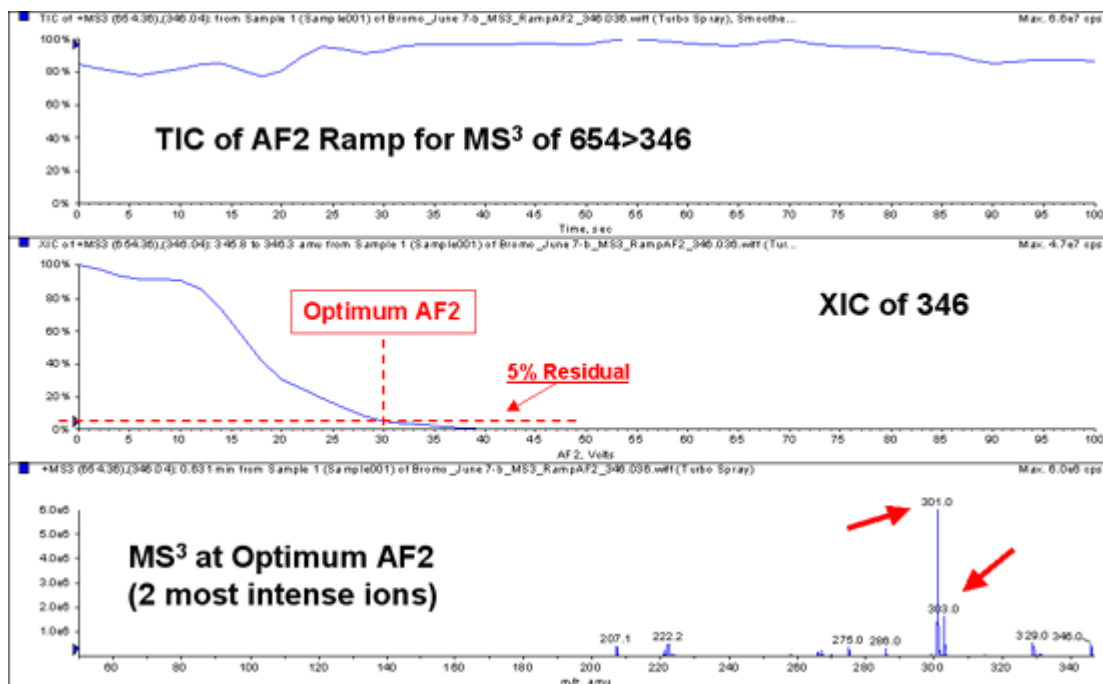
Este paso optimiza la energía de colisión de cada ion de fragmentación seleccionado del análisis de EPI. Esto se realiza mediante análisis de MRM. Utilice rampas de CE de 5 V a 130 V (de -130 V a -5 V en el modo negativo), con un tamaño de paso de 2 V y un tiempo de permanencia de 50 ms. A continuación, cada gráfico superpuesto se suaviza dos veces y las tensiones que contienen el mayor recuento de iones se utilizan como los valores de CE óptimos.

Análisis de MS/MS/MS (MS3)

El script realiza un análisis de MS/MS/MS (MS3) para cada segundo precursor seleccionado a la velocidad de análisis especificada y con una rampa AF2 de 0 V a 100 V, con un tamaño de paso de 2 mV para ambas polaridades. Se define el tiempo de llenado del análisis y, si es necesario, se puede activar Q0trapping para aplicar una sensibilidad máxima. El límite inferior del rango de masas para el análisis MS/MS/MS (MS3) se puede especificar; el límite superior es el segundo precursor +5 amu.

Los gráficos generados se suavizan dos veces y el AF2 óptimo, como se muestra en la figura siguiente, se obtiene cuando la intensidad residual del segundo precursor (basada en el XIC) se encuentra al 5 % de la intensidad máxima. A continuación, se utiliza el espectro en este valor de AF2 para buscar los iones de fragmentación de segunda generación más intensos, excluidos los picos en el rango de ± 1 amu del segundo precursor. Si el valor de la relación m/z del segundo precursor es superior al 10 % del recuento de iones totales, no se utilizará ningún fragmento de ese espectro. Esta condición existe porque, si el valor de la relación m/z del segundo precursor es superior al 10 %, la fragmentación no es suficiente.

Figura 2-12: Determinación del AF2



Generar métodos finales

Tras realizar los análisis de optimización, el script genera los métodos de MS/MS/MS finales. Si se ha seleccionado la opción **Save Optimal Method Only** en el cuadro de diálogo Advanced Settings, solo se creará un método de MS/MS/MS con ± 10 amu en torno al ion de fragmentación de segunda generación más intenso. Si se hace clic en la opción **Save All Final Methods**, se crearán el método óptimo y un método de MS/MS/MS para cada uno de los segundos precursores superiores, utilizando el rango de masas que abarca desde el límite inferior definido por el usuario hasta el límite superior definido como (segundo precursor + 5) amu.

Script MSServiceLog

De manera predeterminada, las lecturas de un espectrómetro de masas se registran en el archivo de registro MS Service. Utilice el script MSServiceLog para desactivar el registro de las lecturas o para empezar a registrar las lecturas del instrumento en el archivo de registro de MS Service. El script MSServiceLog solo es aplicable a los sistemas 4500MD y Citrine.

El script MSServiceLog se puede usar sin un perfil de hardware activo, pero los cambios que se realicen en el registro MS Service solo tendrán efecto una vez que se reactive el perfil de hardware.

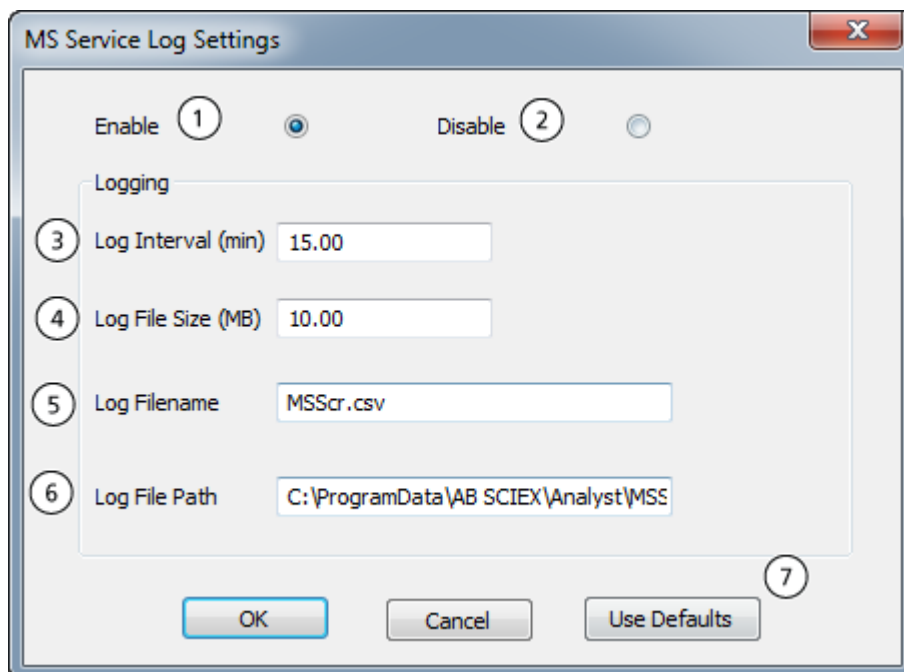
Instalación del script

Consulte [Instalar un script](#).

Usar el script

1. Desactive el perfil de hardware.
2. Haga clic en **Script** > **MSServiceLog**.

Figura 2-13: Cuadro de diálogo de configuración del registro MS Service



Elemento	Nombre	Descripción
1	Enable	Seleccione esta opción para comenzar a registrar las lecturas de un espectrómetro de masas en el archivo de registro MS Service con el script MSServiceLog.
2	Disable	Seleccione esta opción para desactivar el registro de las lecturas de un espectrómetro de masas en el archivo de registro MS Service con el script MSServiceLog.
3	Log Interval (min)	Especifique la frecuencia, en minutos, con la que se registrarán las lecturas del espectrómetro de masas en el archivo de registro MS Service. El valor predeterminado es 15 minutos y el intervalo permitido es de 1 a 1440 minutos.

Elemento	Nombre	Descripción
4	Log File Size (MB)	<p>Especifique el tamaño del archivo de registro. El valor predeterminado es 10 MB y el intervalo permitido es de 1 a 1000 MB. Puede haber un máximo de dos archivos de registro:</p> <ul style="list-style-type: none">• El archivo de registro actual, donde se registran las lecturas del instrumento.• El archivo de registro archivado. <p>Cuando el archivo de registro actual alcanza el tamaño especificado, se archiva con un nombre de archivo predefinido y se crea otro archivo de registro actual para registrar las lecturas con el nombre de archivo de registro en el cuadro de diálogo MS Service Log Settings.</p>
5	Log Filename	<p>Especifique un nombre para el archivo de registro. Las extensiones de archivo aceptadas son csv, txt o log.</p>
6	Log File Path	<p>Especifique la ubicación en la que se guardará el archivo de registro. Asegúrese de que la nueva ubicación se crea dentro de la ubicación predeterminada C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog.</p>
7	Use Defaults	<p>Haga clic en esta opción para volver a los valores preestablecidos en todos los campos del cuadro de diálogo.</p>

3. Haga clic en **Disable** para desactivar el registro de las lecturas en el archivo de registro MS Service.
4. Haga clic en **Enable** para comenzar a registrar las lecturas del espectrómetro de masas en el archivo de registro MS Service.
5. Para cambiar los valores de los demás campos del cuadro de diálogo MS Service Log Settings, consulte la figura: [Figura 2-13](#).
6. Haga clic en **OK** para aceptar los cambios.

Calculadora de sMRM

Utilice el script sMRM Calculator para ver una representación visual de un método de adquisición del algoritmo *Scheduled* MRM. El script utiliza cuatro gráficos para mostrar una descripción general de la transición de MRM, su simultaneidad, su tiempo de ciclo proyectado y el tiempo de permanencia que se le debe aplicar. Consulte la figura: [Figura 2-15](#). Para lograr una disposición adecuada de las transiciones a lo largo del tiempo de ejecución, cambie los valores de los parámetros, como **Maximum Dwell**, **Minimum Dwell**, **Target sMRM Cycle Time** o **Target sMRM Scan Time**, **Window Width**, **MRM Pause Time**

y **Settling Time**, en el cuadro de diálogo del script. Los cuatro gráficos se actualizan en consonancia. Repita este proceso hasta conseguir la organización necesaria de las transiciones.

Nota: Si **Target Cycle Time** se ha seleccionado en el método original, no se puede cambiar a **Target Scan Time** en el cuadro de diálogo del script. Si **Target Scan Time** se ha seleccionado en el método original, no se puede cambiar a **Target Cycle Time** en el cuadro de diálogo del script.

Nota: La opción **Settling time** solo se puede modificar para los sistemas Citrine en el cuadro de diálogo del script sMRM Calculator.

Instalación del script

Consulte [Instalar un script](#).

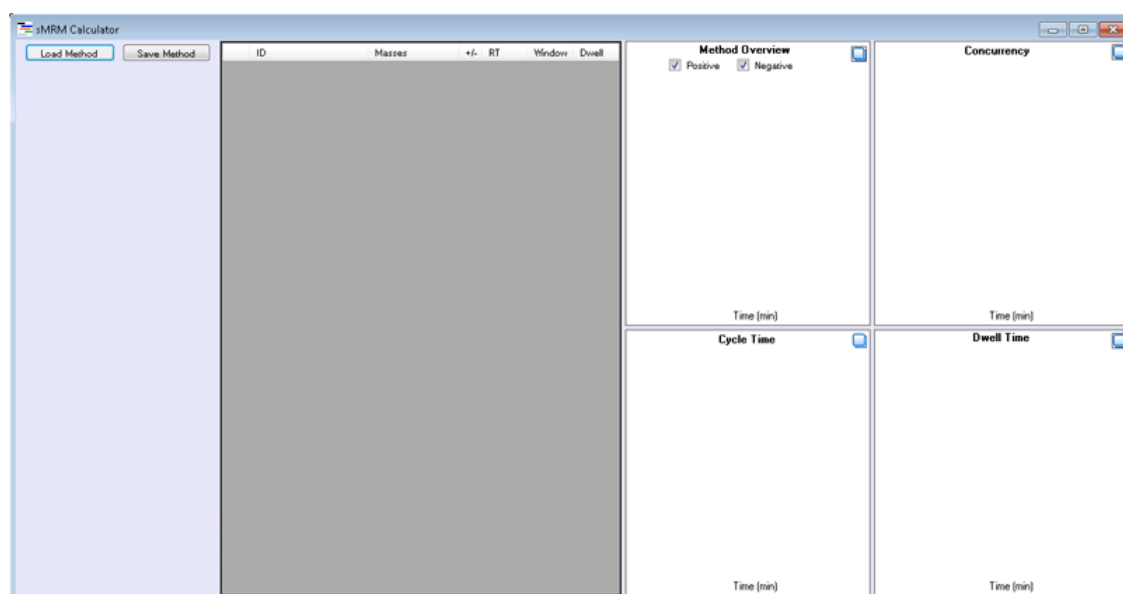
Usar el script

Requisitos previos

- Asegúrese de que el software Analyst MD esté abierto y haya un perfil de hardware activado.
- Asegúrese de que ya haya creado un método de adquisición del algoritmo *Scheduled MRM*.

1. Haga clic en **Script > sMRM Calculator**.
Se abre el cuadro de diálogo **sMRM Calculator**.

Figura 2-14: Cuadro de diálogo de la Calculadora de sMRM



Scripts

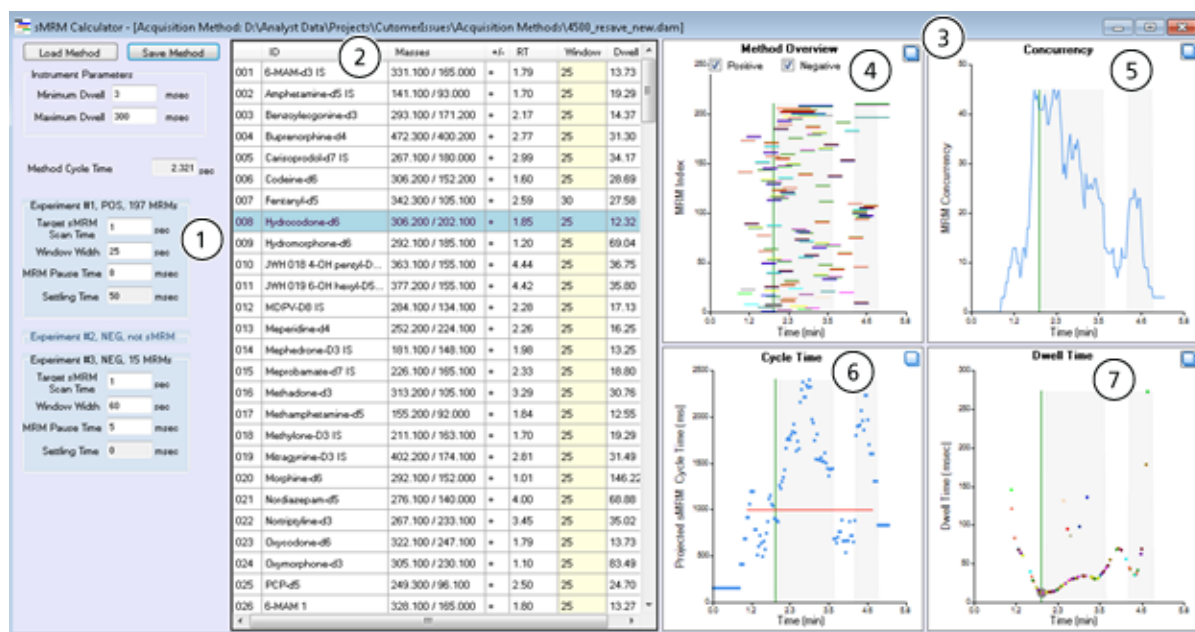
- Haga clic en **Load Method** para seleccionar un método de adquisición de algoritmo *Scheduled MRM* existente.
Se abre el cuadro de diálogo **Open**.

Nota: Solo un método de adquisición que contenga experimentos de algoritmo *Scheduled MRM* y para el espectrómetro de masas activo del proyecto seleccionado actualmente se puede abrir en el script sMRM Calculator. Solo se muestran los detalles de los experimentos de algoritmo *Scheduled MRM*. Los experimentos de algoritmo no *Scheduled MRM* se etiquetan como método de adquisición de algoritmo no *Scheduled MRM* en el script.

- Selecione el método de adquisición del algoritmo *Scheduled MRM* y haga clic en **Open**.

El método de adquisición se abre en el cuadro de diálogo **sMRM Calculator**. La ruta del archivo del método de adquisición abierto se muestra en el título del cuadro de diálogo.

Figura 2-15: Método de adquisición abierto en el cuadro de diálogo sMRM Calculator



Elemento	Descripción
1	<p>El panel de la izquierda contiene los parámetros del instrumento y del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM. Los parámetros que se muestran en este panel cambian en función del método de adquisición abierto.</p> <p>Si la organización de las transiciones no es adecuada en los cuatro gráficos del panel derecho, cambie los parámetros y las opciones editables en el panel izquierdo. Las columnas afectadas de la tabla y los gráficos se actualizan conforme a ello. Los valores del parámetro se pueden modificar dentro del intervalo permitido hasta que se consiga una organización de las transiciones adecuada.</p> <p>Por ejemplo, si se cambia el valor del campo Target sMRM Scan Time, el tiempo de permanencia se recalcula y se actualiza en la tabla; y los gráficos se actualizan en consecuencia.</p> <p>Por ejemplo, si el valor del campo Windows Width cambia, este valor se actualiza en la columna Window para todas las transiciones que utilizan esta configuración global. El tiempo de permanencia de todas las transiciones se recalculará y actualizará en la tabla. Los gráficos del panel derecho también se actualizan conforme a ello. En el caso de transiciones con sus propias opciones de ventana de detección en un método de adquisición del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro, al actualizar el ajuste global Window Width en el panel izquierdo no se actualizan los valores de la columna Window de esas transiciones en la tabla.</p> <hr/> <p>Nota: Los campos que se muestran en gris en el panel izquierdo no se pueden editar y el valor no se puede cambiar.</p> <hr/>

Elemento	Descripción
2	<p>En el panel central se muestran el índice, el ID de compuesto, las masas Q1 y Q3, la polaridad, la anchura de la ventana, el tiempo de retención y el tiempo de permanencia. La vista predeterminada se ordena por número de índice.</p> <p>Para reorganizar la vista a partir de la información de las demás columnas, haga clic en el título de una de las siete columnas: index, ID, Masses, +/-, RT, Window y Dwell. El panel central se actualiza y muestra la información ordenada en el orden alfanumérico o numérico de la columna seleccionada.</p> <p>En el caso de métodos para los sistemas SCIEX 4500MD y Citrine , la anchura de ventana de todas las transiciones de ese experimento de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM también se puede editar en la tabla. El tiempo de permanencia en la tabla y los gráficos del panel derecho se actualizan conforme a ello. Si se edita la anchura de la ventana en la tabla, un método de adquisición de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM se convierte en un método de adquisición de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro.</p> <hr/> <p>Nota: La anchura de la ventana que utiliza el ajuste global del panel izquierdo tiene un fondo amarillo. Cuando la anchura de la ventana se modifica manualmente en la tabla para una transición individual o si ya se utiliza la anchura de ventana avanzada específica para su transición, el color del fondo de esa celda cambia a blanco.</p>
3	<p>El panel derecho muestra de forma gráfica todas las transiciones <i>Scheduled</i> MRM contenidas en el método de adquisición del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM en cuatro gráficos diferentes.</p> <ul style="list-style-type: none"> • La transición de MRM seleccionada en la tabla está representada en los gráficos por la línea verde vertical. • Las áreas de color verde claro representan las zonas de tiempo de retención en las que se produce un cambio de polaridad en cada ciclo. • La información sobre herramientas de cada gráfico muestra debajo del cursor los valores X e Y de la transición. Para los gráficos Method Overview y Dwell Time, también se muestra el ID de compuesto en la información sobre herramientas. • Si se hace clic en una transición de MRM en el gráfico Method Overview, esa transición se selecciona en los otros tres gráficos y la tabla.
4	<p>El primer gráfico, Method Overview, muestra todas las transiciones y la ventana de detección de cada transición. El eje X muestra el tiempo de retención. El eje Y es el número de índice de MRM, que es el orden en el que se introdujo cada transición en el método.</p>

Elemento	Descripción
5	El segundo gráfico, MRM Concurrency, muestra el tiempo de retención en el eje X y la simultaneidad de transiciones de MRM en cada tiempo de retención en el eje Y.
6	<p>El tercer gráfico, Projected sMRM Cycle Time, traza el tiempo de ciclo proyectado en el tiempo de retención. La línea roja representa el Target Cycle Time (tiempo de ciclo objetivo), si se utiliza. Si se utiliza Target Scan Time (tiempo de análisis objetivo), el valor de la línea roja es la suma del tiempo de Target sMRM Scan de todos los experimentos de algoritmo <i>Scheduled MRM</i> del método.</p> <hr/> <p>Nota: Se esperan más puntos de datos para las transiciones cuyo Projected sMRM Cycle Time es muy inferior a Target Cycle Time o a la suma de Target Scan Time (donde está la barra roja). Se esperan más puntos de datos para las transiciones cuyo Projected sMRM Cycle Time es muy superior a Target Cycle Time o a la suma de Target Scan Time (donde está la barra roja).</p> <hr/>
7	El cuarto gráfico muestra el tiempo de permanencia para cada transición como su tiempo de retención. El eje X muestra el tiempo de retención. El eje Y muestra el tiempo de permanencia que se debe aplicar.

4. Cambie los valores del parámetro según sea necesario para optimizar el método y conseguir una mejor distribución del **Projected sMRM Cycle Time**.

5. Haga clic en **Save Method**.
Se abre la ventana **Save Method File**.

Los cambios realizados en el método se pueden guardar en el método de adquisición original o como un método de adquisición nuevo. Si los cambios se guardan en el método de adquisición original, los valores del parámetro original se sobrescriben con los valores nuevos.

6. Escriba un nuevo nombre de archivo o seleccione el método original y, a continuación, haga clic en **Save**.
7. Abra el método de adquisición guardado en **Acquisition Method Editor** para ver los cambios nuevos.
Si el método original se ha abierto en **Acquisition Method Editor**, el método se debe cerrar y volver a abrir.
8. Haga clic en la **X** de la esquina superior derecha del cuadro de diálogo **sMRM Calculator** para cerrarlo.

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.
