
Software Analyst MD

Tutorial del algoritmo *Scheduled* MRM



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.

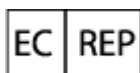
Rx only.

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

Tutorial del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM	5
Objetivos	5
Acerca del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM	5
Documentación relacionada	6
Requisitos previos	7
Creación de un archivo csv o txt	7
Crear un método de adquisición para el algoritmo <i>Scheduled</i> MRM	7
Crear un método de adquisición utilizando dos experimentos de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM	15
Generación de un cromatograma de iones extraídos	15
Ver transiciones de MRM	17
Crear métodos de cuantificación	18
Revisar la tabla de resultados	20
Acerca del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro Algorithm	22
Crear un método de adquisición para el algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro	23
Impacto del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro en IDA	27
Crear un método de adquisición de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro de IDA	27
Ver los parámetros del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Pro en la información del archivo	28
Crear un método de adquisición de algoritmo <i>Scheduled</i> MRM Basic o Pro con <i>Scheduled</i> Ionization	29
 Contacto	 31
Formación del cliente	31
Centro de aprendizaje en línea	31
Soporte SCIEX	31
Ciberseguridad	31
Documentación	31

Tutorial del algoritmo *Scheduled* MRM

Objetivos

Los usuarios aprenderán a:

- Crear un método para supervisar las transiciones del algoritmo *Scheduled* MRM.
- Ver las transiciones del algoritmo *Scheduled* MRM en un cromatograma de iones extraídos (XIC).
- Analizar los datos cuantitativos mediante la creación del método de cuantificación y la revisión de la tabla de resultados.
- Crear un método de adquisición de algoritmo *Scheduled* MRM Pro.
- Crear un método de adquisición de algoritmo *Scheduled* MRM Pro de IDA.

Acerca del algoritmo *Scheduled* MRM

El algoritmo *Scheduled* MRM permite adquirir cientos de compuestos a partir de una lista de transiciones de monitorización de reacciones múltiples (MRM), tiempos de retención e ID de compuestos que se proporcionan al crear el método de adquisición. La funcionalidad del algoritmo *Scheduled* MRM reduce la necesidad de llevar a cabo experimentos en varios periodos. También se puede utilizar como un análisis de estudio en un método IDA (adquisición dependiente de información).

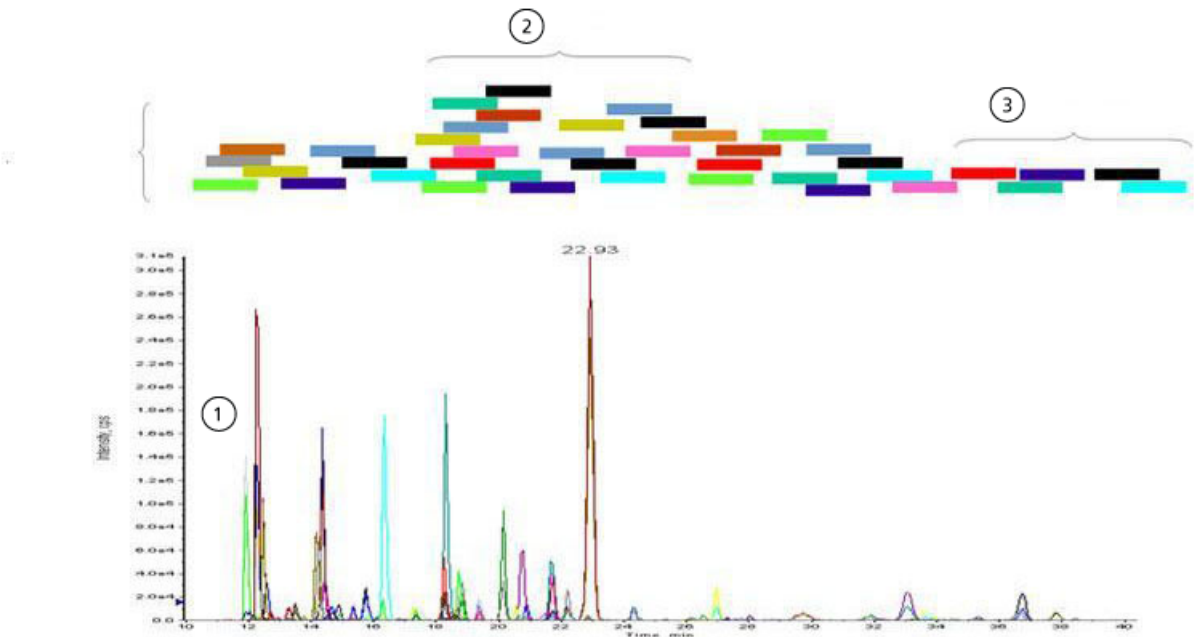
El algoritmo aprovecha al máximo los puntos a lo largo del pico cromatográfico para permitir una detección de picos y una reproducibilidad mejoradas. Con esta función el usuario también puede ver archivos de datos con muchas transiciones de MRM mostrando las columnas de ID de compuesto, índice de Integration Quality del analito e índice de IS (patrón interno) Integration Quality en la tabla de resultados. En el caso de sistemas SCIEX 3200MD, admite un máximo de 1000 transiciones en el algoritmo *Scheduled* MRM. En el caso de sistemas SCIEX 4500MD y Citrine, se admite un máximo de 4000 transiciones en el algoritmo *Scheduled* MRM.

Nota: La columna **Analyte Integration Quality Index** y la columna **IS Integration Quality Index** también están disponibles para los datos de MRM en la tabla de resultados.

En la figura siguiente se muestra un ejemplo de un ciclo de LC del algoritmo *Scheduled* MRM. El número de transiciones de MRM supervisadas simultáneamente varía durante el análisis de LC, pero permanece constante entre las inyecciones.

Figura 1: Ejemplo típico de un ciclo de LC del algoritmo *Scheduled MRM*

Scheduled MRM Algorithm



Elemento	Descripción
1	Transiciones de MRM supervisadas
2	Número elevado de transiciones de MRM supervisadas
3	Número reducido de transiciones de MRM supervisadas

Para procesar un gran número de transiciones con el algoritmo *Scheduled MRM*, utilice el software MultiQuant MD para el procesamiento de datos. Para obtener más información, póngase en contacto con un representante de ventas de SCIEX.

Documentación relacionada

- *Guía de usuario del sistema* del espectrómetro de masas
- *Guía para usuarios avanzados*
- *Guía del usuario de scripts* (para obtener más información sobre el script Crear métodos de cuantificación a partir de archivos de texto y Crear archivos de texto a partir de un método de cuantificación)
- *Tutorial sobre adquisición dependiente de información* (para obtener más información acerca de la creación de métodos mediante IDA)
- *Analyst*

Requisitos previos

Requisitos previos

Los usuarios deben poder:

- Crear un método de adquisición
- Enviar un lote
- Crear un método de cuantificación y crear y revisar una Results Table.

Los siguientes dispositivos periféricos deben incluirse en el perfil de hardware:

- Bomba de LC
- Autosampler

Creación de un archivo csv o txt

Asimismo, la información de las transiciones de los métodos *Scheduled MRM* se puede crear y almacenar en un archivo csv o txt y se puede importar en la tabla de rangos de masa de un método de algoritmo *Scheduled MRM*. Utilice los siguientes criterios para crear un archivo csv o txt:

- El archivo no debe contener títulos de encabezado, columna ni fila.
- El orden y el número de las columnas en el archivo debe coincidir con el orden y el número de las columnas en la tabla de rangos de masas.
- Para los métodos MRM y de algoritmo *Scheduled MRM*, no puede haber celdas vacías. En el caso de métodos de algoritmo *Scheduled MRM Pro*, las columnas **Window** y **Threshold** pueden dejarse vacías para que puedan usarse los valores predeterminados. La columna **Group** también se puede dejar en blanco.

Asegúrese de que el archivo se guarde con la extensión csv o txt.

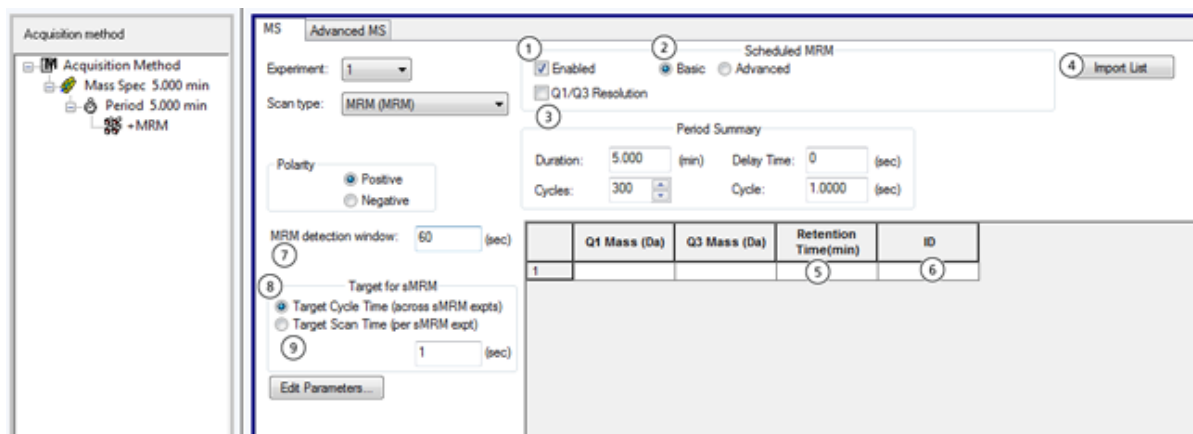
Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled MRM*

Nota: Para sistemas SCIEX 4500MD y Citrine, se puede obtener un máximo de 1250 transiciones MRM no programadas y 4000 transiciones MRM con el algoritmo *Scheduled MRM*. Para los sistemas SCIEX 3200MD, se puede obtener un máximo de 300 transiciones MRM y 1000 transiciones MRM con el algoritmo *Scheduled MRM*.

1. En la barra de navegación bajo **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method** y, a continuación, seleccione el icono **Mass Spec** en el panel Acquisition Method.
2. Asegúrese de que el valor seleccionado en **Scan Type** es **MRM** y, a continuación, active la casilla de verificación **Enabled** del grupo **Scheduled MRM**. Para crear un método para los sistemas SCIEX 4500MD y Citrine, consulte las funciones de la figura: [Figura](#)

2. Para crear un método para los sistemas SCIEX 3200MD, consulte las funciones de la figura: [Figura 3](#).

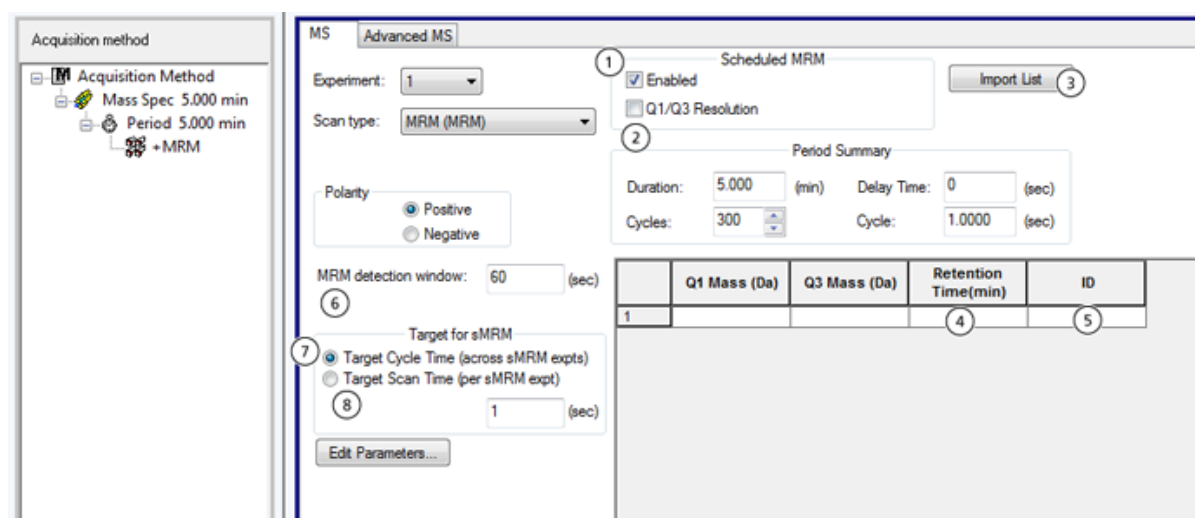
Figura 2: Funciones de software del algoritmo *Scheduled MRM* para los sistemas SCIEX 4500MD y Citrine



Elemento	Descripción
1	Casilla Enabled en el grupo Scheduled MRM : actívela para habilitar las funciones básica y avanzada del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> .
2	Opción Basic : selecciónela para habilitar la función del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> . Basic es la opción predeterminada.
3	Casilla de verificación Q1/Q3 Resolution : selecciónela para aplicar distintas configuraciones de resolución Q1 y Q3 a cada transición. Cuando esta opción esté seleccionada, añada las columnas Q1 Resolution y Q3 Resolution a la tabla de rango de masa.
4	Botón Import List : haga clic en este botón para importar las transiciones de MRM, el tiempo, el identificador y los parámetros dependientes de compuestos de un archivo txt o csv.
5	Columna Retention Time (min) : escriba el tiempo de retención esperado en minutos para la transición de MRM correspondiente. Esta columna muestra el tiempo de permanencia de los métodos de MRM expresado en minutos (min).
6	Columna ID : (opcional) escriba un identificador de compuesto para la transición que le interese.
7	Campo MRM detection window (sec) : escriba el intervalo de tiempo de detección asociado al tiempo de retención de cada transición.

Elemento	Descripción
8	Opción Target Cycle Time (across sMRM experiments) : selecciónela para especificar y utilizar el tiempo de ciclo objetivo para todos los experimentos del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> en todo el periodo o método. Al seleccionar o borrar la opción en un experimento del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> , se aplica automáticamente la misma configuración al otro experimento del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> si hay dos experimentos del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> en el método. Se permite un máximo de dos experimentos del algoritmo <i>Scheduled MRM</i> en un periodo o método. El tiempo del ciclo objetivo es ajustable para que se pueda conseguir un tiempo de ciclo específico para todos los ciclos y obtener puntos de datos distribuidos más uniformemente por el pico, independientemente del conmutador de polaridad entre las transiciones concurrentes dentro de un ciclo. Target Cycle Time es la configuración predefinida.
9	Campo Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) : seleccione esta opción para especificar el periodo de tiempo objetivo que se debe utilizar para el experimento en cada ciclo. El software mantendrá el tiempo total de análisis de este experimento cerca del tiempo objetivo en cada ciclo, a menos que se aplique el tiempo de permanencia mínimo o el tiempo de permanencia máximo a algunas de las transiciones concurrentes. El tiempo de análisis objetivo puede ajustarse con el fin de centrarse en un número de puntos específicos a lo largo de los picos de LC.

Figura 3: Funciones de software del algoritmo *Scheduled MRM* para los sistemas SCIEX 3200MD



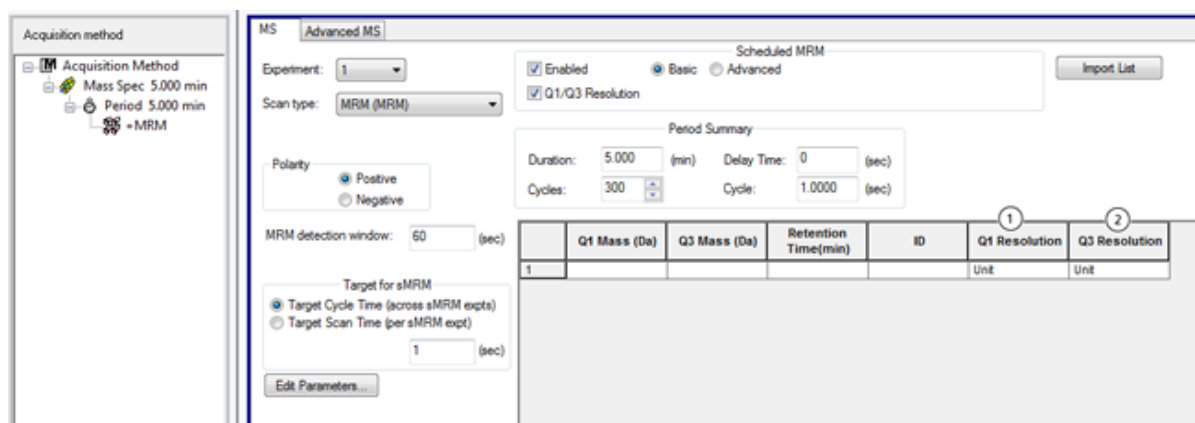
Elemento	Descripción
1	Casilla de verificación Enabled en el grupo Scheduled MRM : selecciónela para habilitar la función del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM.
2	Casilla de verificación Q1/Q3 Resolution : selecciónela para aplicar distintas configuraciones de resolución Q1 y Q3 a cada transición. Cuando esta opción esté seleccionada, añada las columnas Q1 Resolution y Q3 Resolution a la tabla de rango de masa.
3	Botón Import List : haga clic en este botón para importar las transiciones de MRM, el tiempo, el identificador y los parámetros dependientes de compuestos de un archivo txt o csv.
4	Columna Retention Time (min) : escriba el tiempo de retención esperado en minutos para la transición de MRM correspondiente. Esta columna muestra el tiempo de permanencia de los métodos de MRM expresado en minutos (min).
5	Columna ID : (opcional) escriba un identificador de compuesto para la transición que le interese.
6	Campo MRM detection window (sec) : escriba el intervalo de tiempo de detección asociado al tiempo de retención de cada transición.
7	Opción Target Cycle Time (across sMRM experiments) : selecciónela para especificar y utilizar el tiempo de ciclo objetivo para todos los experimentos del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM en todo el periodo o método. Al seleccionar o borrar la opción en un experimento del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM, se aplica automáticamente la misma configuración al otro experimento del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM si hay dos experimentos del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM en el método. Se permite un máximo de dos experimentos del algoritmo <i>Scheduled</i> MRM en un periodo o método. El tiempo del ciclo objetivo es ajustable para que se pueda conseguir un tiempo de ciclo específico para todos los ciclos y obtener puntos de datos distribuidos más uniformemente por el pico, independientemente del conmutador de polaridad entre las transiciones concurrentes dentro de un ciclo. Target Cycle Time es la configuración predefinida.

Elemento	Descripción
8	Campo Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) : seleccione esta opción para especificar el periodo de tiempo objetivo que se debe utilizar para el experimento en cada ciclo. El software mantendrá el tiempo total de análisis de este experimento cerca del tiempo objetivo en cada ciclo, a menos que se aplique el tiempo de permanencia mínimo o el tiempo de permanencia máximo a algunas de las transiciones concurrentes. El tiempo de análisis objetivo puede ajustarse con el fin de centrarse en un número de puntos específicos a lo largo de los picos de LC.

- Para utilizar distintas configuraciones de resolución y en cada transición, haga clic en **Q1/Q3 Resolution** en el grupo Scheduled MRM.

Se añaden dos columnas en la tabla de rangos de masas: Q1 Resolution y Q3 Resolution.

Figura 4: Opción Q1/Q3 seleccionada para sistemas SCIEX 4500MD y Citrine



Elemento	Descripción
1	Columna Q1 Resolution : el modo en el que el análisis Q1 separa componentes poco espaciados. Esta es la capacidad de resolución del primer cuadrupolo. Entre las opciones se incluyen High, Unit, Low u Open.
2	Columna Q3 Resolution : el modo en el que el análisis Q3 separa componentes poco espaciados. Esta es la capacidad de resolución del tercer cuadrupolo. Entre las opciones se incluyen High, Unit, Low u Open.

Las opciones **Resolution Q1** y **Resolution Q3** de la pestaña Advanced MS no están disponibles para utilizar.

Si la casilla de verificación **Q1/Q3 Resolution** está seleccionada en Tune Method Editor, las opciones **Q1 Resolution** y **Q3 Resolution** de la pestaña Resolution no están disponibles para usarse.

4. Complete la tabla de rangos de masas de cada transición de MRM de interés; para hacerlo, utilice uno de los métodos siguientes:
 - Especificar las transiciones de MRM manualmente: especifique la masa Q1, la masa Q3, el tiempo de retención y el identificador de compuesto para cada transición de interés. Para cada transición, seleccione los valores en las columnas **Q1 Resolution** y **Q3 Resolution**. Haga clic con el botón derecho para agregar parámetros dependientes de compuestos, según sea necesario. Puede agregar un máximo de cuatro parámetros dependientes de compuestos a la tabla de rangos de masas.
 - Importar las transiciones de MRM: haga clic en **Import List** y, en el cuadro de diálogo Open, seleccione un archivo de valores separados por comas (csv) o valores separados por tabulaciones (txt) que contenga la información sobre las transiciones de MRM. Una vez seleccionado el archivo, haga clic en **Open**. El contenido del archivo se muestra en la tabla de rangos de masas. Para obtener más información sobre la creación de archivos, consulte la sección [Creación de un archivo csv o txt](#).
 - Copiar y pegar las transiciones de MRM: seleccione las celdas de un archivo csv o txt que contengan la información necesaria y pulse **Ctrl+C**. Para pegar las líneas con la información, seleccione la primera celda **Q1 Mass (Da)** en la tabla de rangos de masas y, a continuación, pulse **Ctrl+V**.

Nota: Antes de importar o de copiar y pegar, asegúrese de que las columnas de datos de los archivos csv o txt coinciden con las de la tabla de rangos de masas del software. El número de columnas y el orden de estas en el archivo de origen y en la tabla de destino deben ser los mismos. Agregue o elimine columnas, o cambie el orden de estas, en el archivo de origen, según sea necesario. Para agregar una columna a la tabla de rangos de masas, haga clic con el botón derecho en la tabla y seleccione un parámetro dependiente de compuestos. Para los parámetros dependientes del compuesto, los valores deben hallarse dentro de los intervalos permitidos para la polaridad escogida.

5. En el campo **MRM detection window (sec)**, escriba el intervalo de tiempo de detección asociado al tiempo de retención de cada transición. Esta ventana debe reflejar la anchura deseada del pico cromatográfico y la variabilidad del tiempo de retención cromatográfica del analito, con el fin de que el pico de MRM completo siempre aparezca en la ventana.

Utilice la cromatografía LC como guía para seleccionar los mejores parámetros del algoritmo *Scheduled* MRM. Determine la anchura de un pico típico en la base y consulte la tabla siguiente para conocer los ajustes recomendados. Asegúrese de tener en cuenta la estabilidad del tiempo de retención al definir la ventana de detección de MRM.

Tabla 1: Configuración recomendada para los parámetros del algoritmo *Scheduled MRM*

Anchura del pico en la base	Intervalo de detección de MRM	Target Scan Time o Target Cycle Time
30 segundos	90 segundos	2 segundos
15 segundos	60 segundos	1 segundo
10 segundos	30 segundos	0,5 segundos

En el algoritmo *Scheduled MRM*, el número de analitos por ciclo controlado se ajusta en función de la ventana del tiempo de retención de los analitos. Para maximizar el tiempo de permanencia de cada analito y su relación señal/ruido, es recomendable utilizar un intervalo de tiempo de retención más pequeño y razonable, con el fin de poder capturar el pico de interés. Un valor de 60 segundos es un buen punto de partida. Este valor es suficiente para una cromatografía que genera una anchura de pico de 15 segundos y un margen de tiempo de retención potencial de 20 segundos, tanto a la izquierda como a la derecha del pico.

Por ejemplo, si el tiempo de retención esperado era de 4,5 minutos, al escribir 60 segundos se establecerá un intervalo de detección entre los minutos 4 y 5.

Nota: Si **Retention Time** se establece en cero (0), el software controlará esa transición durante todo el tiempo de adquisición.

6. Haga una de las siguientes acciones según sea necesario:

- Si es necesario, deje la opción **Target Cycle Time (across sMRM expts)** seleccionada y escriba un tiempo de ciclo objetivo, en segundos, como se muestra en la siguiente figura. Si la opción **Target Cycle Time** está seleccionada, el software intenta aplicar el mismo tiempo de ciclo a todos los ciclos. Sin embargo, el tiempo de ciclo real utilizado para cada ciclo varía principalmente en función de la suma de los tiempos de permanencia de todas las transiciones del ciclo.

El software utiliza el tiempo de ciclo objetivo, los tiempos de cambio de polaridad, si los hay, y todos los tiempos de pausa para calcular el tiempo de permanencia de cada transición dentro de un ciclo. El tiempo de permanencia asignado a una transición depende del tiempo de permanencia calculado para cada ciclo en la ventana de detección, de si el tiempo de permanencia calculado es menor que el tiempo de permanencia mínimo o mayor que el tiempo de permanencia máximo para algunos ciclos y de cuánto se solapa con cada una de las otras transiciones en la ventana de detección. Si el tiempo de permanencia calculado es menor que el tiempo de permanencia mínimo debido a la alta concurrencia o mayor que el tiempo de permanencia máximo debido a baja simultaneidad, entonces se utilizará el tiempo de permanencia mínimo o el tiempo de permanencia máximo para esa transición en ese ciclo para el siguiente paso del cálculo. El promedio de los tiempos de permanencia de todos los ciclos de esta transición es el tiempo de permanencia final asignado a esta transición.

Figura 5: Target Cycle Time (across sMRM expts)

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Under 'Scheduled MRM', the 'Enabled' checkbox is checked, and 'Basic' is selected. 'Q1/Q3 Resolution' is also checked. The 'Period Summary' section shows a duration of 5.000 min, 300 cycles, and a cycle time of 1.0000 sec. The 'Target for sMRM' section has two radio buttons: 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' (selected) and 'Target Scan Time (per sMRM expt)'. The value '1' is entered in the adjacent text box. The 'MRM detection window' is set to 60 sec. A table at the bottom shows columns for Q1 Mass (Da), Q3 Mass (Da), Retention Time (min), ID, Q1 Resolution, and Q3 Resolution.

- Si es necesario, haga clic en **Target Scan Time (per sMRM expt)** y, a continuación, escriba en segundos la duración prevista del experimento para cada ciclo, como se muestra en la siguiente figura. Este parámetro contribuye a definir el número de puntos a lo largo del pico cromatográfico.

Figura 6: Target Scan Time (per sMRM expt)

This screenshot is identical to the previous one, but the 'Target Scan Time (per sMRM expt)' radio button is selected, and the value '1' is entered in the adjacent text box. The 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' radio button is now unselected.

Utilice la anchura de los picos cromatográficos como guía para establecer este valor. Un valor de 1 segundo es un buen punto de partida para una cromatografía que genera una anchura de pico de 15 segundos. En este caso, un tiempo de análisis objetivo de 1 segundo va a generar unos 15 puntos de datos a lo largo de un pico de 15 segundos, cuando no se aplica un tiempo de permanencia mínimo ni máximo a las transiciones simultáneas existentes en esta ventana de detección.

7. Proporcione los valores obligatorios en los campos restantes del método de adquisición.
8. Guarde el método de adquisición en el proyecto en el que se vaya a ejecutar la adquisición.

Nota: Los campos del algoritmo *Scheduled* MRM también están disponibles en Tune Method Editor.

Crear un método de adquisición utilizando dos experimentos de algoritmo *Scheduled* MRM

Utilice este procedimiento para crear un método que permita el cambio de polaridad.

1. Cree un método de adquisición del algoritmo *Scheduled* MRM utilizando los pasos que se describen en la sección [Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM](#).
2. En el panel Acquisition method, haga clic con el botón derecho del ratón en **Period** y, a continuación, haga clic en **Add experiment**.
Se creará un segundo tipo de experimento de MRM.
3. En la pestaña MS, seleccione una de las siguientes opciones en función del espectrómetro de masas que se esté utilizando:
 - En el caso de sistemas SCIEX 4500MD y Citrine, seleccione la casilla de verificación **Enabled** en el grupo **Scheduled MRM**. Para crear un método de adquisición periódico para el algoritmo *Scheduled* MRM, asegúrese de seleccionar la opción **Basic** en el grupo **Scheduled MRM**. Para crear el método, consulte las funciones en la figura [Figura 2](#). Para crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM Pro, asegúrese de seleccionar la opción **Advanced**. Para crear este método, consulte la sección [Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM Pro](#).
 - En el caso de sistemas SCIEX 3200MD, seleccione la casilla de verificación **Enabled** en el grupo **Scheduled MRM**. Para crear el método, consulte las funciones en la figura [Figura 3](#).
4. Complete el método de adquisición tal como se describe en la sección [Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM](#).
5. Guarde el método de adquisición en el proyecto en el que se vaya a ejecutar la adquisición.

Nota: En el caso de sistemas SCIEX 3200MD y SCIEX 4500MD, el tiempo de estabilización predeterminado se aplicará cuando haya un cambio de polaridad en ese ciclo. En el caso de los instrumentos de la serie Citrine, cuando haya un cambio de polaridad en ese ciclo, se aplicará el tiempo de estabilización configurado por el usuario.

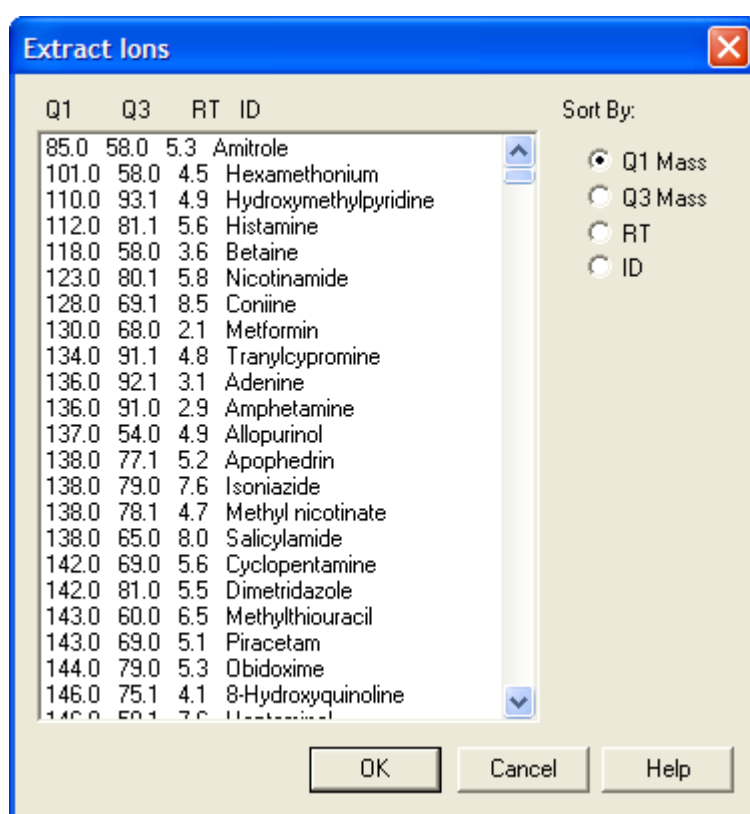
Generación de un cromatograma de iones extraídos

Nota: Si se abre un archivo wiff para el algoritmo *Scheduled* MRM que contenga más de 2500 transiciones, se muestra un TIC en lugar de un XIC.

Tutorial del algoritmo *Scheduled* MRM

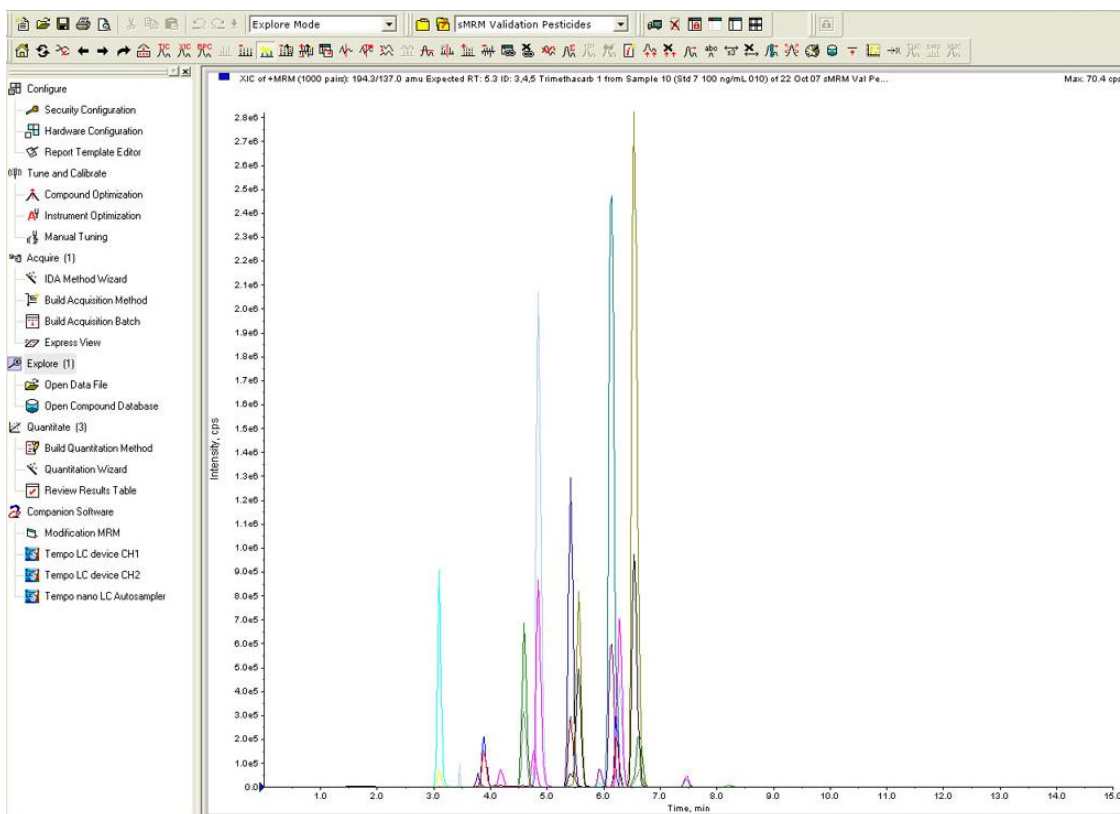
1. Tras generar los datos del algoritmo *Scheduled* MRM utilizando el método de adquisición creado en el procedimiento anterior, en la barra Navigation, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File** y, a continuación, seleccione el archivo de datos y la muestra.
Los datos de MRM y de algoritmo *Scheduled* MRM están configurados para mostrarse como un XIC superpuesto.
2. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Dialog**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Extract Ions con cada una de las transiciones de MRM del archivo de datos seleccionado, acompañada del tiempo de retención previsto y el ID de compuesto correspondiente, si se ha especificado.

Figura 7: Cuadro de diálogo Extract Ions



3. Dispone de las siguientes opciones para ordenar la lista: Masa Q1, Masa Q3, RT (tiempo de retención) o ID (identificador de compuesto).
4. Seleccione una o varias transiciones.
5. Haga clic en **OK**.
El XIC se muestra debajo del cromatograma y el identificador de compuesto de la primera transición seleccionada se muestra en el título.

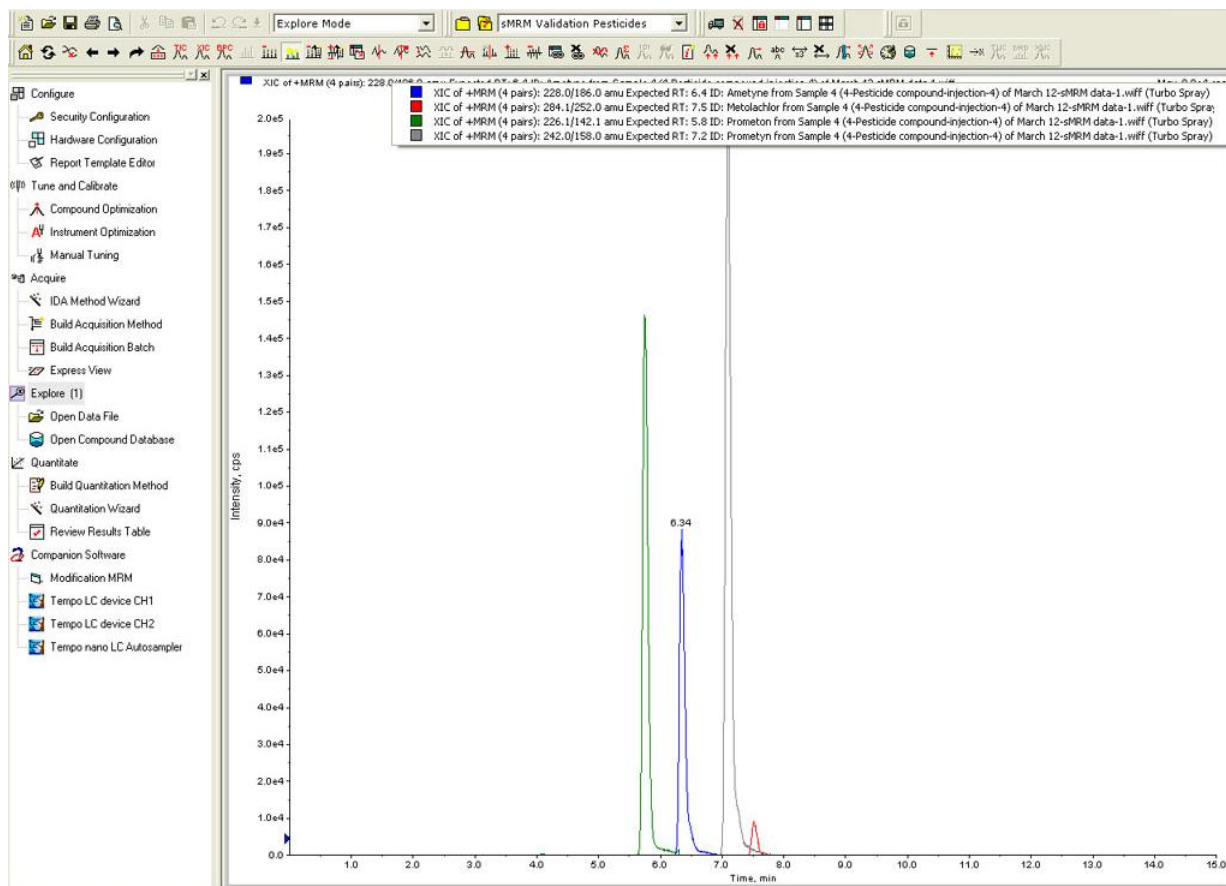
Figura 8: Ejemplo de un XIC superpuesto que se abre cuando se extraen varios iones



Ver transiciones de MRM

1. Genere un XIC.
2. Haga clic con el botón derecho en el título del XIC para mostrar las transiciones de MRM que están activas en la zona. Seleccione la transición de MRM de interés para mostrar una etiqueta del tiempo de retención en el cromatograma.

Figura 9: Transiciones de MRM activas



3. Arrastre el cursor a lo largo del eje X para ampliar una zona de tiempo específica. El XIC se ajustará al pico más alto de los datos mostrados.
4. Haga clic con el botón derecho de nuevo en el título del XIC para mostrar las transiciones de MRM que están activas en la zona de tiempo específica. Se mostrarán todas las transiciones que superen el umbral y se encuentren dentro de la zona ampliada. El título se reducirá al número de transiciones de la zona ampliada.

Crear métodos de cuantificación

Nota: En el software Analyst MD, debe utilizarse Build Quantitation Method para crear un método de cuantificación para un archivo de datos que contenga más de 94 transiciones. El asistente Quantitation Wizard solo puede crear métodos de cuantificación de datos con 94 transiciones o menos.

Antes de empezar, asegúrese de que se esté utilizando el algoritmo de IntelliQuan-MQ III recomendado. Para obtener más información sobre la selección de algoritmos, consulte el documento *Ayuda*.

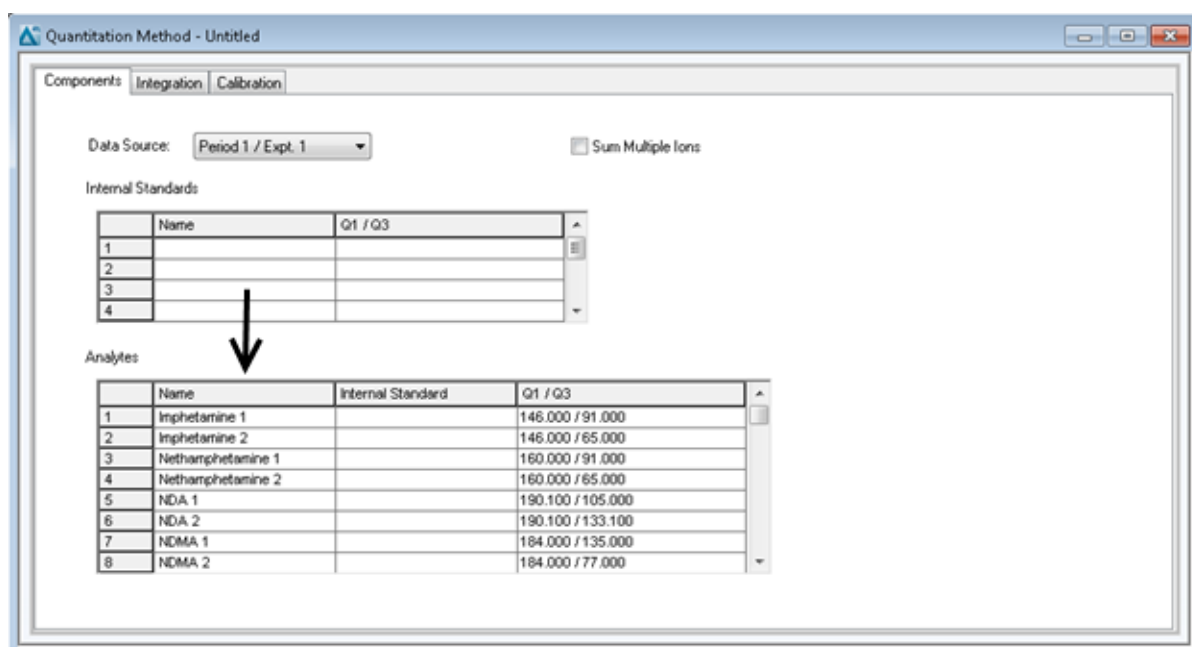
1. En la barra **Navigation**, en **Quantitate**, haga doble clic en **Build Quantitation Method**.

Nota: El asistente de cuantificación se puede utilizar para crear un método de cuantificación y analizar datos que contengan menos de 94 transiciones.

2. Seleccione el archivo de datos y la muestra recién adquirida y, a continuación, haga clic en **OK**.

Se muestra una columna **Name** en la tabla Analytes. Dado que las transiciones se han seleccionado durante la adquisición, esta columna se rellena con el identificador de compuesto del método de adquisición.

Figura 10: Método de cuantificación: pestaña de componentes



Nota: Si hay varios experimentos incluidos en el método, debe revisar cada uno de ellos seleccionándolos en la lista de **Data Source** para poder utilizar los analitos del experimento en el método de cuantificación. Si el número de analitos es elevado, es posible que la lista de **Data Source** tarde algún tiempo en rellenarse.

3. Defina los valores obligatorios en los campos restantes del método de cuantificación y, a continuación, guarde el método.
4. Use el asistente de cuantificación para crear la tabla de resultados. Asegúrese de seleccionar el método de cuantificación que se acaba de crear.

Sugerencia: Si el archivo de datos dispone de un número elevado de transiciones de MRM, utilice el script Create Quan Methods From Text Files y el script Create Text File from Quan Method para crear o modificar un método de cuantificación. Para obtener más información, consulte el documento *Guía de usuario de scripts*.

Revisar la tabla de resultados

1. Para ver los resultados de una transición específica, haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados, seleccione **Analyte** y, a continuación, seleccione la transición en la lista de ID de compuesto.

Figura 11: Tabla de resultados: selección de analitos

	Sample Name	Sample ID		Analyte Peak Name (counts)	Analyte Peak Height (cps)	Compound
1	SYS suit001					
2	SYS suit001					
3	SYS suit001					
4	SYS suit001					
5	SYS suit001					
6	SYS suit001					
7	SYS suit001					
8	SYS suit001					
9	SYS suit001					
10	SYS suit001					
11	SYS suit001					
12	SYS suit001					
13	SYS suit001					
14	SYS suit001					
15	SYS suit001		Un			
16	SYS suit001		Un			
17	SYS suit001		Un			
18	SYS suit001		Un			
19	SYS suit001		Un			
20	SYS suit001		Un			
21	SYS suit001		Un			
22	SYS suit001		Un			
23	SYS suit001		Un			
24	SYS suit001		Un			

2. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Table Settings > Edit** para abrir el cuadro de diálogo Table Settings.
3. Haga doble clic en **Columns** y, a continuación, seleccione **Analyte** en la lista.
4. Junto a **Analyte Peak Name**, seleccione la casilla de verificación **Shown**.
5. Haga clic en **OK** y, a continuación, en **Done**.
La columna **Analyte Peak Name** se agregará a la tabla de resultados y el identificador de compuesto de cada transición se mostrará en esa columna.

Figura 12: Tabla de resultados: columna de nombre del pico del analito

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyamphetamine
2	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyethylamphetamine
3	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymethamphetamine
4	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	6-O-Monoacetylmorphine
5	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoclonazepam
6	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoflunitrazepam
7	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	9-Hydroxynisiperidone
8	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceclidine
9	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceprometazine
10	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aciclovir
11	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Ajmaline
12	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxyalprazolam
13	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxytriazolam
14	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprazolam
15	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprenolol
16	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amantadine
17	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amiloride

- Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Table Settings > Edit** para que se muestren las columnas **Analyte Integration Quality** e **IS Integration Quality** en la tabla.
- Haga doble clic en **Columns** y, a continuación, seleccione **Analyte** en la lista.
- Active la casilla de verificación **Analyte Integration Quality** situada junto a **Shown** y, a continuación, haga clic en **OK**.
- Seleccione **Internal Standard** en la lista.
- Junto a **IS Integration Quality**, seleccione la casilla de verificación **Shown**.
- Haga clic en **OK** y, a continuación, en **Done**.

Las dos columnas se agregarán a la tabla de resultados. La calidad de integración indica la medida en que se integra el pico. Los valores próximos a 1 indican picos correctamente integrados. Los valores inferiores pueden indicar que el pico no está bien integrado, que hay un fondo muy amplio o que puede haber otro pico en la zona.

Estas columnas facilitan la revisión de los picos porque el usuario puede detectar fácilmente los picos con valores índice de **Integration Quality** de analito bajos para una revisión manual. Además, los usuarios pueden ejecutar una consulta en los datos para averiguar los valores índice de **Integration Quality** de analito que son inferiores a un valor considerado aceptable para visualizar y revisar manualmente un subconjunto de datos.

Figura 13: Columnas de la tabla de resultados

	Sample Name	Record Modified	Calculated Concentration (ng/mL)	Accuracy (%)	Analyte Integration Quality	IS Integration Quality	Time
1	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.22	161.	1.00	1.00	0.000000
2	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.29	165.	0.874	1.00	N/A
3	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.74	137.	1.00	1.00	N/A
4	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.20	160.	1.00	1.00	0.000000
5	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.86	143.	0.731	1.00	N/A
6	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.54	127.	1.00	1.00	N/A
7	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.92	123.	1.00	1.00	0.000000
8	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.79	120.	0.852	1.00	N/A
9	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.37	109.	1.00	1.00	N/A
10	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.24	106.	1.00	1.00	0.000000
11	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	112.	0.942	1.00	N/A
12	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	9	1.00	1.00	N/A

Elemento	Descripción
1	Columna del índice de calidad de integración de analito
2	Columna del índice de calidad de integración de estándar interno

Acerca del algoritmo *Scheduled MRM Pro* Algorithm

El algoritmo *Scheduled MRM Pro* es compatible con los sistemas SCIEX 4500MD y Citrine.

El algoritmo *Scheduled MRM Pro* añade funcionalidad avanzada al algoritmo *Scheduled MRM*. Mejora la robustez del tiempo de retención de los experimentos al permitir establecer las ventanas de adquisición para cada transición en el método de adquisición. Los usuarios pueden ajustar ventanas individuales para los compuestos que tienen picos LC amplios o gran variación en sus tiempos de retención.

Además, el algoritmo *Scheduled MRM Pro* incluye la siguiente funcionalidad:

- El algoritmo *Scheduled MRM Pro* también es compatible con la ampliación automática de ventanas durante la adquisición. Los usuarios tienen la opción de activar o desactivar la opción Dynamic Window Extension (DWE). También se pueden establecer diferentes umbrales de activación y de DWE para cada transición individual. Por ejemplo, un umbral de activación bajo y un umbral de DWE alto tienen más probabilidades de activar una transición secundaria pero evitar una ampliación de ventana dinámica innecesaria. Cuando DWE está activado, si un compuesto se ha desplazado a un tiempo de retención posterior y la intensidad no ha caído por debajo del umbral de ampliación después de que haya pasado su tiempo de retención, el algoritmo *Scheduled MRM Pro* amplía automáticamente la ventana de detección hasta que la intensidad cae por debajo del umbral. Se controla la transición durante otra mitad de la ventana de detección especificada del método. La ventana de detección después de la ampliación tiene una duración de hasta el doble de la ventana de adquisición especificada. Esto permite utilizar ventanas más pequeñas, pero al mismo tiempo se garantiza que cada pico se capture

en su totalidad. Además, también aumenta la robustez del método a la mayoría de los desplazamientos en el tiempo de retención.

- El usuario puede etiquetar múltiples transiciones para un analito como principales o secundarias. Las transiciones principales se controlan en la ventana de adquisición, mientras que las transiciones secundarias solo se controlan después de que las transiciones principales alcancen su umbral de activación. Esto minimiza el tiempo del ciclo al reducir el número de transiciones MRM controladas. El tiempo de adquisición se centra en la obtención de datos para los analitos que están presentes en una muestra y no en los analitos que no están presentes en la muestra.
- El algoritmo también admite el uso de peso de permanencia. Dwell Weight permite que el tiempo de permanencia necesario se exprese de manera relativa. Se pueden asignar a compuestos muy abundantes un peso de permanencia bajo, mientras que se asigna a los compuestos menos abundantes un peso de permanencia elevado. Durante el análisis, el tiempo de permanencia disponible se asigna en función de dicho peso.
- El algoritmo admite la sustracción de fondo dinámica (Dynamic Background Subtraction o DBS) para activar transiciones secundarias. La opción DBS solo está disponible para métodos diferentes a IDA y experimentos que utilizan el algoritmo *Scheduled* MRM. Para estos métodos o experimentos, cuando DBS está activado, se aplica a las transiciones principales para activar transiciones secundarias en ese experimento.

Para los métodos IDA que utilizan el algoritmo *Scheduled* MRM para análisis de estudio, si DBS está activado en los criterios IDA, entonces se aplica a las transiciones principales para activar tanto transiciones secundarias como análisis dependientes.

Cuando está activado tanto DWE como DBS para el experimento con algoritmo *Scheduled* MRM, la activación de DWE depende de los datos no procesados sin DBS de las transiciones principales.

Cuando DBS está activado para un experimento que utiliza el algoritmo *Scheduled* MRM y una vez activadas las transiciones secundarias, estas continuarán adquiriendo hasta que las transiciones principales dejen de adquirir.

Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM Pro

La función del algoritmo *Scheduled* MRM Pro solo es compatible con los sistemas SCIEX 4500MD y Citrine.

Utilice este procedimiento para crear un método de algoritmo *Scheduled* MRM Pro en la ventana Method Editor. Este tipo de método también se puede crear en la ventana Manual Tune.

1. Active un perfil de hardware para el espectrómetro de masas compatible. En el caso de sistemas Citrine, si es preciso, seleccione un modo de masa diferente en el perfil de hardware y, a continuación, active el perfil de hardware.
2. Abra un método de adquisición del algoritmo *Scheduled* MRM existente o cree uno utilizando el procedimiento que se describe en la sección [Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM](#).

Tutorial del algoritmo *Scheduled MRM*

3. Seleccione la opción **Advanced** en la sección **Scheduled MRM** de la pestaña MS en Acquisition Method Editor. Esto activa la función del algoritmo *Scheduled MRM Pro*.

Se añaden cinco columnas nuevas a la tabla de rangos de masas y se muestran dos casillas de verificación, **Dynamic Window Extension** y **Dynamic Background Subtraction**, en la sección **Scheduled MRM**.

Figura 14: *Scheduled MRM Pro*

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Group	MRM Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Dwell Weight
				1	2	3	4	5

Elemento	Descripción
1	Group column: utilice esta columna para agrupar las transiciones de un compuesto. Asigne el mismo nombre a todas las transiciones que forman parte de un grupo.
2	Campo MRM Window (sec) : especifique el tiempo, en torno al tiempo de retención, durante el que se controlará la transición. Los valores para las transiciones de este campo sustituirán a aquellos en la ventana de método predeterminada en el campo MRM detection window . La columna MRM Window es similar al campo de la ventana de detección MRM, pero el valor introducido solo se aplica a dicha transición específica. Si se deja en blanco, el valor se toma del campo MRM detection window .
3	Primary/Secondary: utilice esta columna para especificar si una transición es principal o secundaria. Las transiciones principales se controlan para toda la ventana de adquisición. Las transiciones secundarias se controlan dentro de la ventana de adquisición, siempre y cuando todas las transiciones principales están por encima de los umbrales individuales. Asigne el número 1 a las transiciones principales y 2 a las transiciones secundarias en un grupo. Puede haber varias transiciones principales y secundarias en un grupo.

Elemento	Descripción
4	<p>Trigger Threshold: especifique la intensidad que dispare las transiciones secundarias. En los métodos IDA, también se utiliza Trigger Threshold para activar análisis dependientes.</p> <p>Este valor puede ser 0 o superior.</p>
5	<p>Dwell Weight: utilice esta columna para especificar si una transición específica debe tener un tiempo de análisis superior (tiempo de permanencia) que otras transiciones. El valor predeterminado es 1.</p> <p>Dwell Weight permite que el tiempo de permanencia necesario se exprese de manera relativa. Se pueden asignar a compuestos muy abundantes un peso de permanencia bajo (<1), mientras que se asigna a los compuestos menos abundantes un peso de permanencia elevado (>1). El intervalo para el peso de permanencia es de 0,1 a 10. Durante el análisis, el tiempo de permanencia disponible se asigna en función de dicho peso.</p> <hr/> <p>Nota: El peso de permanencia total es igual a la suma de los pesos de permanencia de todas las transiciones principales y la mitad de la suma de los pesos de permanencia de todas las transiciones secundarias del ciclo. Sin embargo, la asignación del tiempo de permanencia aun así utiliza cada peso de permanencia individual dividido entre el peso de permanencia total. Por ejemplo, el peso de permanencia es 1 tanto para las transiciones principales como para las secundarias en un método que contenga solo dos transiciones con el mismo tiempo de retención. El peso de permanencia total es $1 + 0,5 = 1,5$. El tiempo de permanencia para ambas transiciones será el tiempo de permanencia total que se puede asignar a todas las transiciones concurrentes multiplicado por $1/1,5$. El tiempo de permanencia total que se puede asignar se obtiene restando los tiempos de pausa y los tiempos de cambio de polaridad, si procede, y después se corrige con un factor de 1,2. Todas las entradas en blanco para el peso de permanencia utilizan 1 de forma predeterminada.</p> <hr/> <p>Nota: Cuando el tiempo de permanencia no es el mismo para todos los ciclos para una transición durante su ventana de tiempo de retención, para la adquisición se usará el tiempo de permanencia medio de todos los ciclos.</p>

Elemento	Descripción
6	Dynamic Window Extension: seleccione si desea habilitar la ampliación de ventana dinámica en el método de adquisición de <i>Scheduled MRM Pro</i> . Si la ampliación de ventana dinámica (DWE) no se utiliza, desactive la casilla de verificación Dynamic Window Extension . Cuando está seleccionado DWE, se añade una nueva columna Extension Threshold a la tabla de rangos de masa. Si está seleccionado DWE y si la intensidad del pico de una transición sigue superando el umbral de extensión después de que haya pasado su tiempo de retención, entonces el algoritmo <i>Scheduled MRM Pro</i> extiende automáticamente el periodo de detección hasta que la intensidad caiga por debajo del umbral de extensión y la transición será monitoreada durante otra mitad del periodo de detección especificado por el método. El periodo de adquisición después de la ampliación puede ser de hasta el doble del periodo de detección especificado para el método.
7	Dynamic Background Subtraction: seleccione si desea utilizar sustracción de fondo dinámica en el método de adquisición de <i>Scheduled MRM Pro</i> . En un método IDA activado por el algoritmo <i>Scheduled MRM Pro</i> , la casilla de verificación Dynamic Background Subtraction no está disponible en el experimento del algoritmo <i>Scheduled MRM Pro</i> si está habilitada en los criterios IDA. Si la casilla de verificación Dynamic Background Subtraction en los criterios de IDA está seleccionada, se usa para lanzar tanto transiciones secundarias como análisis dependientes.
8	Extension Threshold: especifique el valor del umbral para la ampliación de la ventana dinámica en el método de adquisición <i>Scheduled MRM Pro</i> . Este valor puede ser cero o superior. Consulte la figura: Figura 15 .

Figura 15: Ventana Dynamic Window Extension seleccionada: columna Extension Threshold

The screenshot shows the 'MS Advanced MS' interface. On the left, there are settings for 'Experiment: 1', 'Scan type: MRM (MRM)', 'Polarity: Positive', and 'MRM detection window: 60 (sec)'. On the right, the 'Scheduled MRM' section is active, showing 'Enabled' checked, 'Basic' selected, and 'Advanced' unselected. Below this, 'Q1/Q3 Resolution' is unchecked, 'Dynamic Window Extension' is checked, and 'Dynamic Background Subtraction' is checked. A 'Period Summary' box shows 'Duration: 5.000 (min)', 'Delay Time: 0 (sec)', 'Cycles: 300', and 'Cycle: 1.0000 (sec)'. At the bottom, a table with columns: 'Q1 Mass (Da)', 'Q3 Mass (Da)', 'Retention Time(min)', 'ID', 'Group', 'MRM Window (sec)', 'Primary / Secondary', 'Trigger Threshold', 'Extension Threshold', and 'Dwell Weight' is shown. The 'Extension Threshold' column is highlighted with a red circle and the number 8.

4. Complete la tabla de rangos de masas de cada transición de MRM indicando los valores adecuados en las cinco columnas del algoritmo *Scheduled* MRM Pro. Utilice las reglas siguientes y la información de la figura: [Figura 14](#).
 - Todas las transiciones del mismo grupo deben enumerarse consecutivamente en la tabla de rangos de masas.
 - Todas las transiciones del mismo grupo deben tener el mismo tiempo de retención en la columna **Retention Time (min)**.
 - Todas las transiciones del mismo grupo deben tener el mismo tiempo en la columna **MRM Window (sec)**.
 - Todas las transiciones primarias del mismo grupo deben introducirse antes de las transiciones secundarias en un grupo. Si un grupo solo tiene una transición, esta debe ser la transición primaria.
5. Guarde el método de adquisición.

El método de adquisición del algoritmo *Scheduled* MRM Pro solo puede contener un periodo y un máximo de dos experimentos de algoritmo *Scheduled* MRM.

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.

Crear un método de adquisición de algoritmo *Scheduled* MRM Pro de IDA

1. Cree un método de adquisición del algoritmo *Scheduled* MRM Pro utilizando el procedimiento que se describe en la sección [Crear un método de adquisición para el algoritmo *Scheduled* MRM Pro](#).
2. Si es necesario, para añadir un experimento de tipo de análisis ER, hágalo antes de añadir los criterios IDA.
3. Haga clic con el botón derecho del ratón en el icono **Period** y, a continuación, haga clic en **Add IDA Criteria Level**.
4. Especifique los parámetros de los criterios IDA. Consulte el documento *Tutorial sobre adquisición dependiente de información*.
5. Haga clic con el botón derecho del ratón en el icono **Period** y, a continuación, haga clic en **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. Si es necesario, copie o añada más experimentos dependientes.
Depende de los criterios IDA, de los iones más intensos de X a Y.
8. Especifique los parámetros del experimento.
9. 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 de algoritmo IDA *Scheduled MRM* Pro, se utiliza el umbral de disparo para cada transición MRM para iniciar análisis dependientes en lugar del umbral IDA.

Nota: Para optimizar un método *Scheduled MRM* para la asignación del tiempo de permanencia, la simultaneidad y el tiempo de ciclo proyectado, instale y utilice el script de sMRM Calculator. Para obtener más información, consulte el documento *Guía de usuario de scripts*.

Ver los parámetros del algoritmo *Scheduled MRM* Pro en la información del archivo

Una vez completada la adquisición de una muestra, la información del archivo de datos adquirido con el método del algoritmo *Scheduled MRM* Pro muestra todos los parámetros definidos por el usuario para cada transición. Estos parámetros incluyen lo siguiente:

- **MRM** (que se va a programar o no)
- **Q1**
- **Q3**
- **Retention Time**
- **ID**
- **Group**
- **MRM Window (sec)**
- **Primary/Secondary**
- **Trigger Threshold**
- **Extension Threshold** (si la casilla de verificación **Dynamic Window Extension** se ha seleccionado)
- **Dwell Weight**
- **Q1 Resolution**
- **Q3 Resolution** (si la casilla de verificación **Q1/Q3 Resolution** se ha seleccionado)

También se muestran los parámetros **Dynamic Background Subtraction**, **Dynamic Window Extension**, **Dwell Time**, **Target Scan Time** o **Target Cycle Time**.


1. En la barra **Navigation**, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File**.
Se abrirá el cuadro de diálogo **Select Sample**.
2. En el panel **Data Files**, seleccione el archivo **wiff**.
3. En el panel **Samples**, seleccione la muestra.
4. Haga clic en **OK**.
Se muestran los datos adquiridos de la muestra.
5. Para ver la información del archivo, haga clic en **Show File Info**  en la barra de herramientas.
El panel **File Information** se abre debajo del gráfico.
6. Amplíe el período requerido en el panel izquierdo del panel **File Information**.
7. Haga clic en el enlace al experimento del período necesario.
Los valores para los parámetros del algoritmo *Scheduled MRM Pro* para cada transición se registran en la sección **Period Experiment** seleccionada del panel derecho.

Figura 16: *Scheduled MRM Pro* en File Info

File Info

Log Info

Acquisition Info

Quant. Info

Period 1

Period 1 Experiment 1:

Parameter Table

Resolution tables

Calibration tables

Instrument Parameters

Keyed Text

Period 1:

Scans in Period: 120

Min. Dwell Time: 3 ms

Max. Dwell Time: 250 ms

Relative Start Time: 0.00 msec

Experiments in Period: 1

Use target Cycle Time: No

Target Cycle Time: N/A

Period 1 Experiment 1:

Scan Type: MRM (MRM)

Scheduled MRM: Yes

Polarity: Positive

Scan Mode: N/A

Ion Source: Turbo Spray

Dynamic Window Extension: Yes

Dynamic Background Subtraction: Yes

sMRM Q1Q3 Resolution: Yes

MRM detection window: 60 sec

Target Scan Time: 1.0000 sec

Resolution Q1: N/A

Resolution Q3: N/A

Intensity Thres.: 0.00 cps

Settling Time: 0.0000 msec

MR Pause: 5.0070 msec

MCA: No

Step Size: 0.00 Da

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)	sMRM Dwell (msec)	Param	Start	Stop	ID
609.200	195.000	1.00	250.000				

Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight	Group	Q1 Resolution	Q3 Resolution
0.5	1	1	10000000	1.0	A	High	Unit

Crear un método de adquisición de algoritmo *Scheduled MRM Basic* o *Pro* con *Scheduled Ionization*

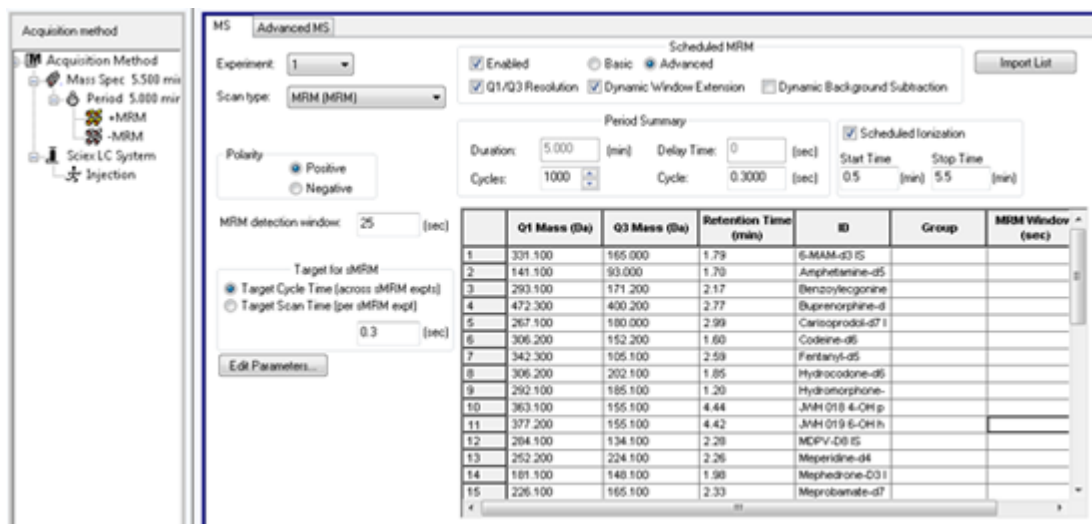
1. Crear un método de adquisición de algoritmo *Scheduled MRM Basic* o *Pro*.
2. Seleccione cualquiera de los experimentos del método y, a continuación, seleccione la casilla de verificación **Scheduled Ionization**.
3. En el grupo **Scheduled Ionization**, escriba los valores apropiados para **Start Time** y **Stop Time**. Asegúrese de que los picos de interés se eluyan entre el **Start Time** y

el **Stop Time**. Si **Dynamic Window Extension** también está seleccionado, asegúrese de que **Stop Time** sea posterior al último tiempo de retención en la tabla de masas más una vez y media la ventana de detección para esa transición. Asegúrese también de que el método de adquisición **Synchronization Mode** y el método de LC estén establecidos 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 siguiente muestra que se utiliza el **LC Synchronization Mode** y que el método de LC dura 7 minutos. Todos los picos de interés se eluyen una vez transcurridos 0,5 minutos y antes de que transcurran 5,0 minutos. Dado que puede que la última ventana eluida de adquisición de pico esté ampliada por una ventana de detección completa, se utiliza 5,5 minutos para **Stop Time**. Cuando se utiliza **Scheduled Ionization**, se aplica una tensión 0 de **IonSpray** antes de **Start Time** y después de **Stop Time**. La tensión de **IonSpray** establecida en el método de MS 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 17: Algoritmo *Scheduled MRM Pro* con *Scheduled Ionization*



4. Guarde el método de adquisición.

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.
