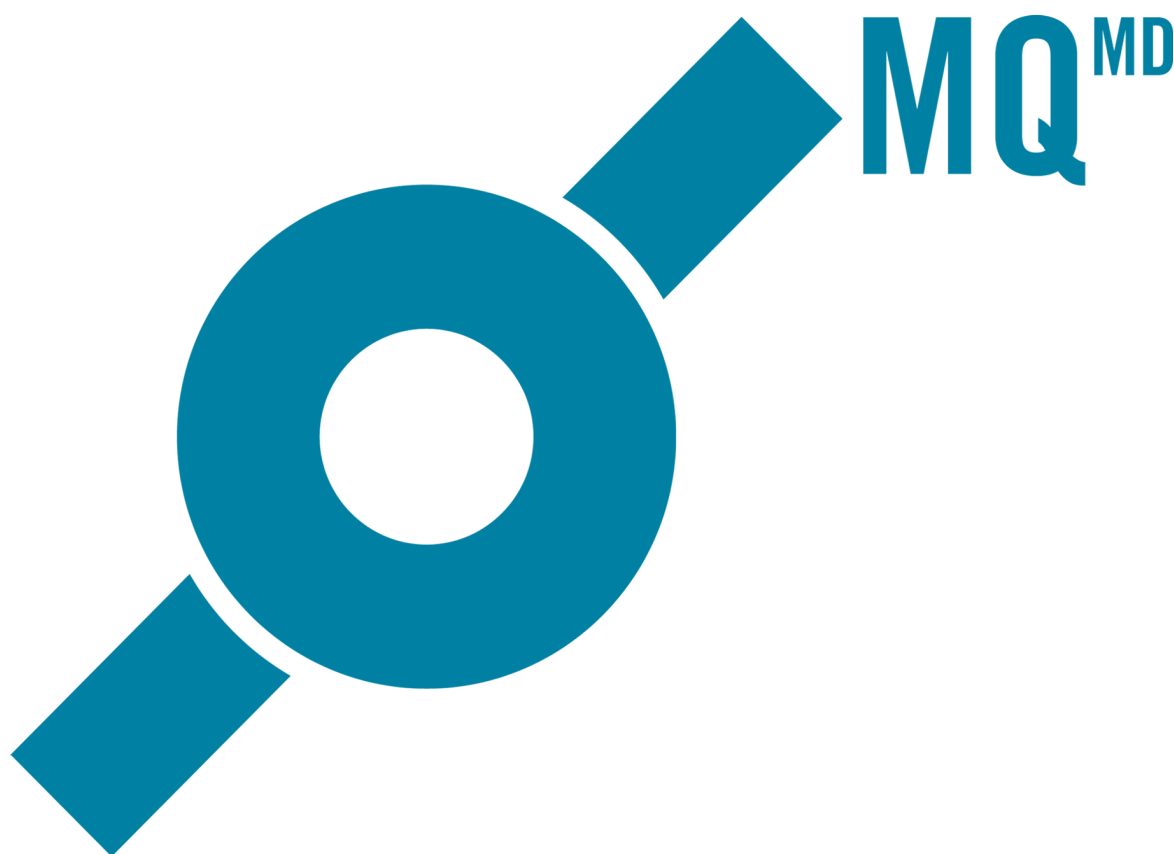

Software MultiQuant™ MD 3.0.3

Guía de referencia



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.

CE

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*.

Rx only.

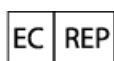
No está disponible en todos los países. Póngase en contacto con un representante de ventas de SCIEX para obtener más detalles.

AB Sciex está haciendo negocios como SCIEX.

Las marcas comerciales aquí mencionadas son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios.

AB SCIEX™ se está usando bajo licencia.

© 2017 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.
1e Tochtweg 11,
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel
Países Bajos



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPUR 739256

Contenido

1 Introducción al software.....	7
Ayuda del software.....	7
Tipos de archivo.....	8
Contacto.....	8
Asistencia técnica.....	8
2 Menú File.....	9
Importar un método de cuantificación.....	10
Submenú Export.....	11
Exportar tablas de resultados.....	11
Exportar la métrica de la tabla de resultados.....	13
Transfer to LIMS.....	14
3 Menú Edit.....	15
Modificación del método de la tabla de resultados.....	17
Unidades y valores predeterminados de calibración del proyecto.....	18
Configuración de exportación segura del proyecto.....	18
4 Menú Process.....	19
Export Calibration.....	19
Importar calibración externa.....	20
5 Menú Audit Trail.....	22
Visor de pistas de auditoría.....	22
Ver los resultados de pistas de auditoría en el visor de pistas de auditoría.....	22
Buscar palabras clave.....	24
Filtrar eventos auditados.....	24
Exportar el visor de pistas de auditoría.....	26
Imprimir el visor de pistas de auditoría.....	26
Gestor de pistas de auditoría.....	26
Acerca de los mapas de auditoría.....	27
Crear un mapa de auditoría.....	27
Cambiar el mapa de auditoría.....	30
Edit the Audit Map.....	31
Ver la configuración de auditoría integrada.....	34
6 Menú Help.....	36
7 Tablas de resultados.....	37
Lista de componentes y grupos.....	38
Menú contextual de la tabla de resultados.....	39
Aplicar concentraciones reales del analito actual a todo.....	40
Configuración de columna.....	40
Filtro de tipo de muestra.....	42
Ver filas ocultas.....	43

Contenido

Cuadros de diálogo de la tabla de resultados.....	43
Select Samples.....	43
Select Method.....	44
Select Representative Sample.....	45
Define Components.....	46
Define Integration.....	49
Outlier Settings.....	52
Columnas de la tabla de resultados.....	54
8 Revisión de picos.....	62
Integración manual.....	62
Apply.....	63
Sugerencias para revisar picos.....	63
Menú contextual de la revisión de picos	64
Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Appearance.....	65
Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Zooming.....	67
Configurar formato de título de revisión de picos.....	68
Copiar parámetros.....	69
Pegar parámetros.....	69
Configurar pico como no encontrado.....	70
Usar pico.....	70
Actualizar el método de cuantificación para el componente.....	70
Actualizar el método de cuantificación para el grupo.....	70
Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro del grupo.....	71
Revertir el pico al método original.....	71
Revertir todos los picos del componente.....	71
9 Revisión de las muestras una al lado de otra.....	72
Realizar una revisión de las muestras una al lado de otra.....	72
10 Panel de calibración.....	74
Cuadro de diálogo Regression Options.....	74
Sugerencias de calibración.....	75
Menú contextual de calibración.....	75
11 Tablas de estadísticas.....	77
Sugerencias para la tabla de estadísticas.....	78
Menú contextual de la tabla de estadísticas.....	79
12 Gráficos de métricas.....	80
Generar un gráfico de métricas.....	80
Guardar la configuración del gráfico de métricas.....	80
Sugerencias para los gráficos de métricas.....	80
Menú contextual del gráfico de métricas.....	81
Cuadro de diálogo Regression.....	82
13 Editor de métodos de cuantificación.....	84
Pestaña Components.....	84
Submenú de grupos.....	85
Submenú de patrones internos.....	87
Pestaña Integration.....	88
Cuadro de diálogo Highlight Components.....	89
Cuadro de diálogo Update Retention Times.....	90
Pestaña Outlier Settings	90

14 Tutorial de flujo de trabajo de análisis de cuantificación.....	92
Acerca de las curvas de calibración.....	92
Requisitos previos.....	92
Modificar las columnas mostradas en la tabla de resultados.....	92
Procesar datos usando el algoritmo de integración SignalFinder™.....	94
Configurar los parámetros de integración de picos.....	94
Crear una tabla de resultados.....	95
Revisar picos.....	99
Modificar la curva de calibración.....	100
Revisar las estadísticas de muestras.....	101
Procesar datos usando el algoritmo de integración MQ4.....	102
Configurar los parámetros de integración de picos.....	102
Crear una tabla de resultados.....	103
Revisar picos.....	107
Modificar la curva de calibración.....	108
Revisar las estadísticas de muestras.....	109
Algoritmos de integración.....	110
Acerca del algoritmo de integración SignalFinder.....	110
Parámetros de integración del algoritmo SignalFinder™.....	113
Parámetros del algoritmo de integración MQ4.....	117
Tareas opcionales.....	120
Crear gráficos de métricas.....	120
Crear columnas personalizadas.....	120
Acerca de los archivos de métodos de cuantificación y métodos integrados.....	121
A Parámetros del algoritmo de integración.....	122
Parámetros del algoritmo de integración SignalFinder.....	122
Parámetros del algoritmo de integración MQ4.....	125
B Ecuaciones de regresión.....	128
Factores de ponderación.....	129
Regresiones.....	129
Linear.....	130
Lineal a cero.....	130
Factor de respuesta promedio.....	130
Cuadrática.....	131
Potencia.....	131
Wagner.....	131
Hill.....	132
Calcular las concentraciones finales.....	132
Lineal.....	132
Lineal a cero y factor de respuesta promedio.....	132
Cuadrática.....	132
Potencia.....	132
Wagner.....	132
Hill.....	133
C Reports.....	134
Crear informes.....	134
Crear plantillas de informes personalizadas.....	135
Plantillas de informes.....	136
Etiquetas de plantillas de informes.....	138

Contenido

D Cálculos de ruido relativo y relación señal/ruido.....152
 Nota sobre la relación señal/ruido cuando se usa el algoritmo de
 integración SignalFinder.....156

E Iconos del software.....157

F Acceso al software MultiQuant™ MD.....164
 Configuración de seguridad.....167

Historial de revisiones.....171

Introducción al software

1

Este documento describe las funciones disponibles en el software MultiQuant™ MD.

El acceso al software está basado en la función asignada al usuario en el software Analyst® MD. Asegúrese de que cada usuario tiene asignado el acceso correcto al software.

Este software solo es compatible con las versiones en inglés de los siguientes sistemas operativos Microsoft:

- Windows 7 (32 y 64 bits) con SP1
- Windows 10

PRECAUCIÓN: El formato de números, divisas, fechas y horas debe definirse en «English (United States)». Configurar el formato con un valor diferente puede dar lugar a datos erróneos.

El software MultiQuant™ MD con pista de auditoría y funciones de seguridad requiere la licencia completa y el software Analyst® MD instalado.

Las formas controladas de generar datos desde el software consisten en exportar tablas de resultados, transferir a LIS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las tablas de resultados, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar aquellos métodos de salida no controlados para un fin regulado.

Nota: El software MultiQuant™ MD utiliza la información de bloqueo de pantalla del software Analyst® MD. No se necesita una configuración adicional para el software MultiQuant™ MD.

Nota: La estructura de archivos y carpetas se debe mantener para poder ver los cromatogramas. Si se han de mover los datos, mueva entonces todo el proyecto, manteniendo la estructura de archivos.

Ayuda del software

El software tiene información sobre herramientas y mensajes de error que proporcionan información adicional sobre la funcionalidad del software.

- Si un campo no está disponible, mueva el cursor sobre el campo para mostrar información sobre herramientas que explica por qué no está disponible la funcionalidad. La información adicional incluye la forma de habilitar el campo o qué configuración de seguridad se necesita para habilitar el campo.
- Los mensajes de error contienen información sobre la configuración de seguridad necesaria para usar la funcionalidad.

Tipos de archivo

Tabla 1-1 Tipos de archivo del software

Tipo de archivo	Descripción
*.qsession	Tabla de resultados del software MultiQuant. Contiene datos de pistas de auditoría de cuantificación.
*.qmethod	Método de cuantificación del software MultiQuant.
*.qmap	Mapa de auditoría del software MultiQuant.
*.mqcal	Archivo de calibración externa.
*.cset	Archivo de configuración de columna.

Contacto

Soporte SCIEX

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

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

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

Para consultar las últimas directrices sobre ciberseguridad de los productos SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

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 de SCIEX en sciex.com.

Tabla 2-1 Opciones del menú File

Opción de menú	Descripción
New Results Table	Cuantifica un conjunto de datos y luego crea una tabla de resultados. Selecciona los archivos de datos para procesar, así como el método de cuantificación que aplicar. Consulte Cuadros de diálogo de la tabla de resultados en la página 43 .
New Quantitation Method	Crea un editor de métodos de cuantificación después de seleccionar la muestra. Típicamente, el usuario crea un método como parte del asistente New Results Table. Sin embargo, este comando es útil si el usuario quiere crear un método, pero no quiere aplicarlo inmediatamente a una colección de muestras creando una tabla de resultados. <ul style="list-style-type: none"> El panel de navegación muestra las subcarpetas, archivos wiff y muestras disponibles en la carpeta Data para el proyecto seleccionado. Expanda las carpetas individuales para ver todas las subcarpetas o archivos wiff. Expandir el archivo wiff para que se vean las muestras disponibles.
Open Results Table	Abre una tabla de resultados guardada anteriormente. Después de seleccionar el comando, se abre un cuadro de diálogo Open estándar. Consulte Tablas de resultados en la página 37 .
Open Quantitation Method	Abre un método de cuantificación guardado anteriormente. Después de seleccionar el comando, se abre un cuadro de diálogo Open estándar. Consulte Editor de métodos de cuantificación en la página 84 .
Save	Se usa para guardar la tabla de resultados o el editor de métodos de cuantificación activos en un archivo. Si la tabla de resultados o el editor de métodos de cuantificación no se han guardado nunca, entonces se pide al usuario un nombre de archivo. Si no, se sobrescribe la versión anterior.
Save As	Se usa para guardar la tabla de resultados o el editor de métodos de cuantificación activos en un archivo nuevo.
Recent Results Table	Contiene elementos de submenú para cada tabla de resultados usada recientemente. Seleccione uno de los elementos para abrir el archivo correspondiente.
Recent Quantitation Methods	Contiene elementos de submenú para cada método de cuantificación usado recientemente. Seleccione uno de los elementos para abrir el archivo correspondiente.

Tabla 2-1 Opciones del menú File (continuación)

Opción de menú	Descripción
Import	Crea un nuevo método de cuantificación a partir de un archivo de texto. Típicamente, el usuario crea un método manualmente usando el comando New Quantitation Method (consulte Editor de métodos de cuantificación en la página 84) o como parte del proceso de crear una nueva tabla de resultados (consulte Tablas de resultados en la página 37). Este comando es útil si el usuario quiere crear o modificar un método de cuantificación. En este caso, cree un método manualmente y luego utilice el comando Quantitation Method as Text .
Export	Contiene comandos para exportar métodos de cuantificación como archivos .qmethod o .txt. Consulte Submenú Export en la página 11 . Las formas controladas de generar datos de salida desde el software consisten en exportar tablas de resultados, transferir a LIMS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las tablas de resultados, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar los métodos de salida no controlados para fines regulados.
Transfer to LIMS	Se necesita un archivo de licencia de LIMS para activar esta función. Consulte Transfer to LIMS en la página 14 .
Export and Save Results Table	La exportación de tablas de resultados es uno de los métodos controlados para la generación de datos.
Create Report and Save Results Table	Crea un informe en Microsoft Word utilizando el software Reporter. Consulte Reports en la página 134 . Cuando se crea una plantilla personalizada, el usuario es responsable de validarla. El usuario puede editar el formato de número en el editor de plantillas de informes. Si el formato de número no está especificado en la plantilla, en el informe se utiliza el formato de Results Table Column Setting .
Exit	Salida del programa. Se le pide al usuario que guarde todos los datos sin guardar.

Importar un método de cuantificación

1. Haga clic en **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Seleccione el archivo de texto.
3. Seleccione una muestra representativa.

Se abre el Quantitation Method Editor.

4. Guarde el método en el formato *.qmethod para que se pueda utilizar posteriormente para cuantificar un nuevo juego de datos.

Submenú Export

Las formas controladas de generar datos de salida desde el software consisten en exportar tablas de resultados, transferir a LIMS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las tablas de resultados, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar aquellos métodos de salida no controlados para un fin regulado.

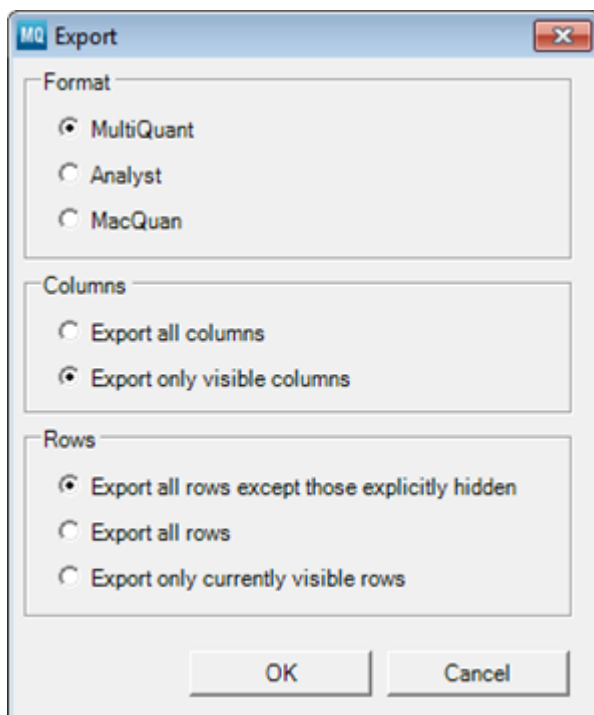
Tabla 2-2 Opciones del menú Export

Opción de menú	Descripción
Results Table-Metric	Crea un archivo de texto delimitado por marcas de tabulación que contiene información de la tabla de resultados activa. Consulte Exportar la métrica de la tabla de resultados en la página 13 .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Exporta el método de cuantificación a un archivo nuevo. Cuando se crea una tabla de resultados, con ella se guarda internamente una copia del método de cuantificación utilizado para generar la tabla. Esto resulta útil si se ha eliminado o modificado el método de cuantificación original y el usuario desea aplicar el método original a un nuevo lote de muestras mediante la creación de una tabla de resultados.
Results Table's Quantitation Method as Text	Exporta una copia de ese método en formato texto. Cuando se crea una tabla de resultados, con ella se guarda internamente una copia del método de cuantificación utilizado para generar la tabla.
Quantitation Method as Text	Estos archivos contiene una fila de encabezado y una fila por cada componente (analito o patrón interno). Hay una columna para el nombre del componente, el rango de masas, cada uno de los parámetros de integración, etc. Las filas de los encabezados no se deberán modificar ni se deberán añadir o eliminar columnas si el método de cuantificación se va a importar al software MultiQuant™ MD. Si se cambia una fila de encabezado de una columna que especifica un parámetro de integración, o se elimina la columna en sí, se aplicará el valor predeterminado especificado en User Integration Defaults para ese parámetro de integración a todos los componentes. Si se cambia o elimina la fila de encabezado de cualquier otra columna, el método no se importará. El usuario deberá abrir el método y confirmar que todos los cambios necesarios están presentes en el método de cuantificación importado. Consulte la Tabla 2-1 .

Exportar tablas de resultados

Nota: El fabricante no asume ninguna responsabilidad o eventual obligación, incluidos daños indirectos o consecuentes, una vez que los datos se hayan exportado desde el software. La tabla de resultados se exporta con una precisión total, independientemente del formato de número especificado en la configuración de columna.

Figura 2-1 Cuadro de diálogo Export



Etiqueta	Descripción
Format	
MultiQuant	Selecione para exportar con precisión total. En este formato, el archivo de texto contiene una fila de encabezado que utiliza el mismo nombre de columna según se muestra en la Results Table . Este es el formato recomendado para exportar Results Tables .
Analyst	Selecciónelo para exportar con la precisión definida en la configuración de la columna. Este formato es el mismo que el exportado por las Results Tables de cuantificación del software Analyst [®] MD. La diferencia entre este formato y el formato anterior es que los encabezados de columna usan nombres ligeramente diferentes en algunos casos (para adaptarse al formato del software Analyst [®] MD) y hay filas de encabezados adicionales para cada analito que describe la calibración.
MacQuan	Este formato es similar al del software Analyst [®] MD, salvo porque los nombres de encabezado de columna coinciden con los utilizados por el paquete de cuantificación MacQuan.
Columns	
Export all columns	Selecione para exportar todos los campos posibles, incluyendo las columnas actualmente ocultas en la Results Table .

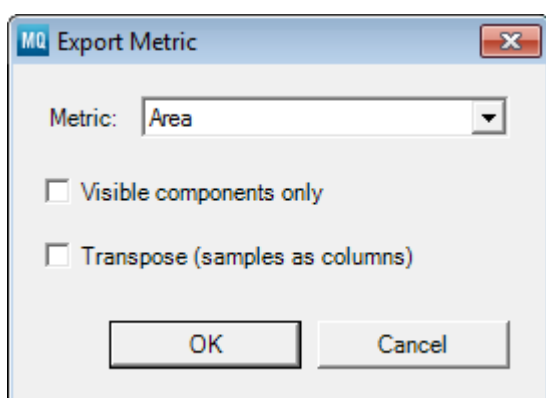
Etiqueta	Descripción
Export only visible columns	Selecione para exportar solo las columnas que se muestran actualmente en la Results Table . El usuario puede seleccionar también qué columnas son visibles utilizando el comando Results Table Column Settings . Consulte Menú contextual de la tabla de resultados en la página 39 .
Rows	
Export all rows except those explicitly hidden	Selecione para exportar todas las filas excepto aquellas que estén ocultas a causa de un filtrado específico. Consulte Iconos del software en la página 157 . Las filas que estén ocultas a causa de un filtrado por Sample Type o por Component se exportan.
Export all rows	Selecione este elemento para exportar todas las filas (es decir, todos los componentes para todas las muestras).
Export only currently visible rows	Selecione para exportar solo las filas que se muestran actualmente en la Results Table . Las filas que estén ocultas a causa de un filtrado por Sample Type o por Component no se incluyen.

Exportar la métrica de la tabla de resultados

Nota: El fabricante no asume ninguna responsabilidad o eventual obligación, incluidos daños indirectos o consecuentes, una vez que los datos se hayan exportado desde el software. La **Results Table** se exporta con una precisión total, independientemente del formato de número especificado en la configuración de columna.

Se utiliza para crear archivos de texto separados por marcas de tabulación que contienen la información de la tabla de resultados activa.

Figura 2-2 Cuadro de diálogo Export Metric



Etiqueta	Descripción
Metric	Seleccione el campo que se va a exportar. Consulte Columnas de la tabla de resultados en la página 54 .
Visible components only	Si esta opción está seleccionada, entonces solo se exportan al archivo aquellos componentes para los que actualmente hay visible al menos una fila correspondiente en la tabla de resultados. Si esta opción no está seleccionada, entonces la información se exporta para todos los componentes.
Transpose (samples as columns)	Si esta opción está seleccionada, entonces el archivo resultante tiene una columna para cada muestra y una fila para cada componente (analito o patrón interno). Si esta opción no está seleccionada, hay una columna para cada componente y una fila para cada muestra.

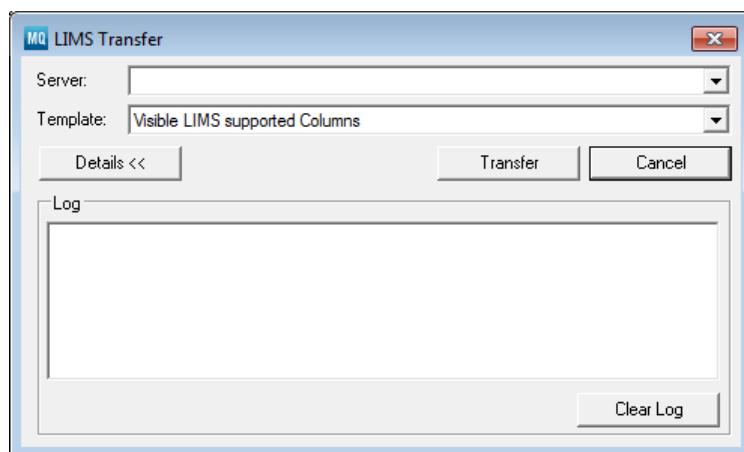
Transfer to LIMS

Este comando solamente está disponible cuando hay abierta una tabla de resultados. Se necesita un archivo de licencia de LIMS para activar esta función.

Las formas controladas de generar datos de salida desde el software consisten en exportar tablas de resultados, transferir a LIMS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las tablas de resultados, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar los métodos de salida no controlados para fines regulados.

1. Haga clic en **Help > Install License** para activar una licencia.

Figura 2-3 Cuadro de diálogo LIMS Transfer



2. Escriba el nombre del servidor en el campo **Server** con el formato siguiente: **http:\\dirección IP del servidor;número de puerto**.
3. Seleccione una plantilla de la lista **Template**.
4. Haga clic en **Transfer**.

Tabla 3-1 Opciones del menú Edit

Opción de menú	Descripción
Clear	Deselecciona la selección actual. Esto se aplica cuando la pestaña Components del Quantitation Method Editor tiene una o más filas seleccionadas.
Copy	Cuando la Results Table está activa, este comando copia al portapapeles la parte seleccionada de la tabla. Cuando el gráfico Peak Review o Calibration está activo, se copia una imagen del gráfico.
Paste	Cuando la Results Table está activa con una zona editable seleccionada, este comando pega celdas o columnas desde el portapapeles.
Copy Entire Table	Cuando una Results Table o una Statistics Table están activas, este comando copia al portapapeles todos los datos. En caso de una Results Table , solo se copian las filas y las columnas visibles actualmente.
Fill Down	Cuando la Results Table está activa con una zona editable seleccionada, este comando replica la información de la primera fila seleccionada a todas las demás filas seleccionadas posteriormente.
Select all Rows	Selecciona todas las filas de la Results Table o Statistics Table actualmente activa. Esta función es útil si el usuario quiere después aplicar un comando, como Copy , que actúa en las filas seleccionadas.
Modify Results Table Method	<p>Hace cambios al método de cuantificación asociado con la Results Table actualmente activa. Esto es útil si el usuario quiere añadir o quitar componentes. Para modificar solamente los parámetros de integración, utilice Update Quantitation Method for Group. Consulte Revisión de picos en la página 62.</p> <p>Cuando se selecciona el comando, se abre el cuadro de diálogo Quantitation Method Editor. Los datos se vuelven a procesar y la Results Table se actualiza para mostrar los datos. Consulte Editor de métodos de cuantificación en la página 84 y Cuadros de diálogo de la tabla de resultados en la página 43.</p> <p>Al volver a aplicar el Quantitation Method se sobrescriben todos los picos modificados manualmente para el componente especificado y luego se vacían todas las casillas de verificación de la columna Modified de la Results Table.</p>

Tabla 3-1 Opciones del menú Edit (continuación)

Opción de menú	Descripción
Project Integration Defaults	Establece los parámetros predeterminados de búsqueda de picos que se usan cuando se crea un método de cuantificación. Si hay más de unos pocos componentes, configure los valores por defecto basados en la cromatografía, para que no haya necesidad de ajustarlos individualmente para cada componente. Sin embargo, no es probable que un solo conjunto de parámetros sea idóneo para todos los componentes, por lo que podría ser necesario ajustar ciertos parámetros individualmente para algunos componentes. Consulte Parámetros del algoritmo de integración en la página 122 .
Project Units & Calibration Defaults	Establece las unidades de concentración y los parámetros de regresión predeterminados que se usan cuando se crea un método de cuantificación. El usuario puede también configurar estos parámetros cuando crea el método en sí. Sin embargo, si se usa la misma configuración, es más fácil establecer los valores predeterminados después de usar este comando. Consulte Unidades y valores predeterminados de calibración del proyecto en la página 18 .
Project Secure Export Settings	Si está seleccionado, los datos del archivo de texto se cifran durante la exportación. Defina una contraseña para activar el cifrado. Consulte Configuración de exportación segura del proyecto en la página 18 .
Enable Project Modified Peak Warning	No está seleccionado de forma predeterminada. Si está seleccionado, cuando un usuario realiza un cambio a un cromatograma en una Results Table y después guarda los cambios, se abre un mensaje de advertencia en el que se indica que se ha realizado un cambio. El usuario tiene la opción de continuar guardando o bien volver a la Results Table . Consulte Modificación del método de la tabla de resultados en la página 17 .

Tabla 3-1 Opciones del menú Edit (continuación)

Opción de menú	Descripción
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Cuando esta función está habilitada, cada vez que se calcula un cromatograma de iones extraídos (XIC) para una muestra y componente en particular, este se guarda para usarlo más adelante mientras que la tabla de resultados asociada permanezca abierta.</p> <p>Por ejemplo, si el usuario crea una Results Table cuando esta función está habilitada, los cromatogramas en el panel Peak Review aparecen rápidamente porque se han almacenado en caché con anterioridad durante el proceso de integración inicial para crear la Results Table, y no es necesario volverlos a calcular a partir de la información en el archivo wiff. Si el usuario abre una Results Table previamente guardada, entonces los cromatogramas individuales se tienen que calcular la primera vez que se muestran en el panel Peak Review. Sin embargo, volver a un cromatograma anterior en particular será más rápido.</p> <p>Debe haber suficiente memoria en el ordenador para almacenar en caché todos los cromatogramas. Sin embargo, para conjuntos de muestras muy grandes con un número grande de analitos, esta opción se debe deshabilitar para evitar mensajes de falta de memoria.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Cuando está habilitado el comando Cache Chromatograms for Faster Peak Review, este comando se usa para calcular y luego almacenar en caché todos los cromatogramas para la Results Table activa. Para un conjunto de datos grande, la ejecución de este comando podría tardar algún tiempo. Sin embargo, después de terminado, todos los cromatogramas quedan almacenados en caché y la revisión de picos es más rápida. El comando se puede detener si es necesario.</p> <p>Lleve a cabo esta operación si hay que revisar muchos cromatogramas. Si se habilitó inicialmente la opción Cache Chromatograms for Faster Peak Review, no es necesario realizar de nuevo esta operación después de crear una Results Table porque los cromatogramas ya están almacenados en caché. Este comando es útil después de abrir una Results Table guardada anteriormente.</p>

Modificación del método de la tabla de resultados

Hace cambios al método de cuantificación asociado con la Results Table actualmente activa. Esto es útil si el usuario quiere añadir o quitar componentes. Para modificar solamente los parámetros de integración, utilice el comando **Update Quantitation Method for Group**. Consulte [Actualizar el método de cuantificación para el grupo en la página 70](#).

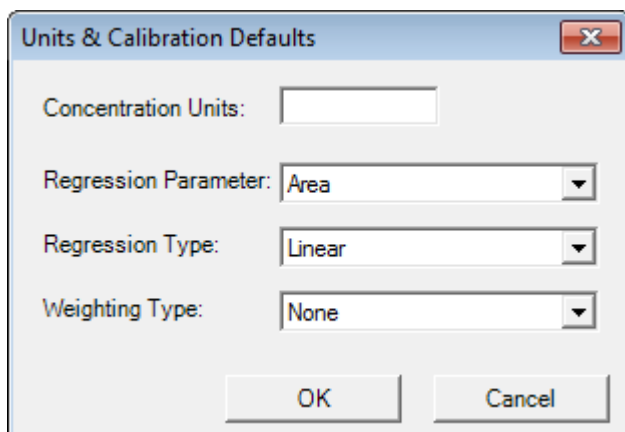
Cuando se selecciona el comando, se abre el cuadro de diálogo del editor de métodos de cuantificación. Los datos se vuelven a procesar y la tabla de resultados se actualiza para mostrar los nuevos datos. Consulte [Editor de métodos de cuantificación en la página 84](#).

Al volver a aplicar el Quantitation Method se sobrescriben todos los picos modificados manualmente para el componente especificado y luego se vacían todas las casillas de verificación de la columna **Modified** de la **Results Table**.

Unidades y valores predeterminados de calibración del proyecto

Establecen los valores de **Concentration Units**, **Regression Parameter** (Area o Height), **Regression Type** y **Weighting Type**. Los distintos tipos de regresión y ponderación se describen en [Ecuaciones de regresión en la página 128](#).

Figura 3-1 Units & Calibration Defaults



Configuración de exportación segura del proyecto

Los datos del archivo de texto se cifran durante la exportación. Defina una contraseña para activar el cifrado. Consulte la [Figura 3-2](#).

Figura 3-2 Cuadro de diálogo Secure Export Settings

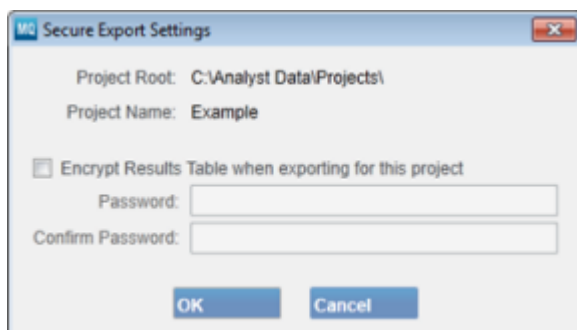


Tabla 4-1 Opciones del menú Process

Opción de menú	Descripción
Add Samples	Añade muestras adicionales a una Results Table actualmente activa. Consulte Select Samples en la página 43 . Aparece una barra de progreso mientras se integran las nuevas muestras y se añaden a la tabla existente. El usuario debe tener el permiso Add samples to Results Table habilitado para llevar a cabo esta tarea.
Remove Selected Samples	Elimina las muestras seleccionadas de la Results Table actualmente activa. El usuario debe tener el permiso Remove samples from Results Table habilitado para llevar a cabo esta tarea.
Show Only Outliers	Muestra solo las filas que contienen valores atípicos. Haga clic en Process > Show Only Outliers . Para mostrar todas las filas, vuelva a hacer clic en Process > Show Only Outliers .
Go to Next Outlier	Avanza hasta el siguiente valor atípico en la Results Table . Haga clic en Process > Go to Next Outlier .
Export Calibration and Save Results Table	Guarda una copia de la ecuación de calibración para todos los analitos asociados con la Results Table activa a un archivo externo (*.mqcal). Esto permite que la calibración a partir de un conjunto de muestras estándar se aplique a otras muestras que no forman parte de la misma Results Table . Consulte Export Calibration en la página 19 .
Import External Calibration	Aplica una calibración exportada anteriormente a la Results Table activa. Una alternativa al uso de este comando es especificar el archivo de calibración externa desde el asistente New Results Table , como se describe en Define Integration en la página 49 . Consulte Importar calibración externa en la página 20 .
Remove External Calibration	Elimina una calibración externa previamente aplicada desde la Results Table activa.

Export Calibration

Guarda una copia de la ecuación de calibración para todos los analitos asociados con la **Results Table** activa a un archivo externo (*.mqcal). Esto permite que la calibración a partir de un conjunto de muestras estándar se aplique a otras muestras que no forman parte de la misma **Results Table**.

El flujo de trabajo típico es:

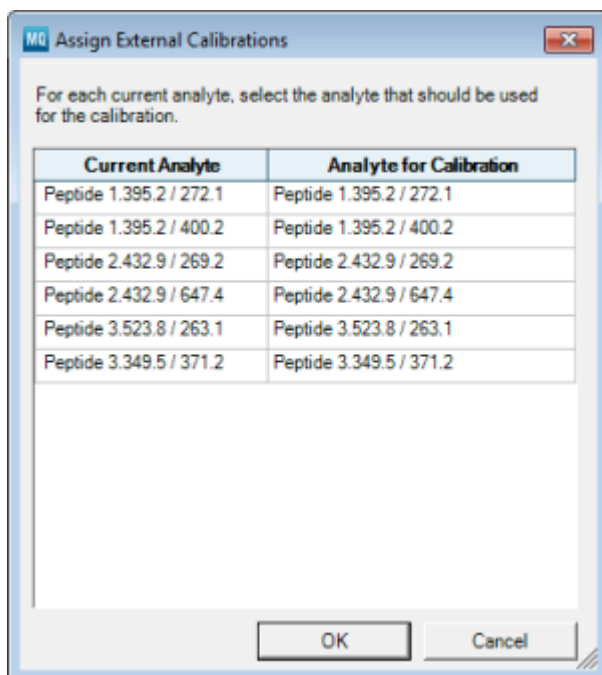
1. Cree una **Results Table** nueva que contenga solo las **Standard**.
2. Utilice el panel **Peak Review** para asegurarse de que la integración se realizó correctamente.
3. Utilice el comando **Export Calibration** para guardar una copia de la calibración.
4. Cree una **Results Table** nueva que contenga muestras de concentración desconocida.
5. Aplique la calibración exportada anteriormente a la nueva tabla usando el comando **Import External Calibration** o especificando el archivo de calibración.
6. Repita los pasos 4 y 5 según sea necesario.

Si se cambia la **Results Table** original (con las muestras **Standard**), todas las calibraciones exportadas previamente no se actualizan de forma automática. La **Results Table** se tiene que exportar de nuevo.

Importar calibración externa

Si se usan los mismos nombres de analito en la **Results Table** actual y en la calibración exportada, entonces el cuadro de diálogo se rellena automáticamente y el usuario puede hacer clic en **OK**. Si los analitos en la **Results Table** actual están asignados a grupos específicos y si los analitos en la calibración exportada están asignados a grupos con los mismos nombres, entonces el cuadro de diálogo se rellena automáticamente. Si hay más de unos pocos analitos, entonces utilice los mismos nombres de analito en ambos casos o sea consistente en el uso de nombres de **Group**.

Figura 4-1 Cuadro de diálogo Assign External Calibrations



Etiqueta	Descripción
Current Analyte	Contiene una entrada para cada analito del método de cuantificación para la Results Table actual.
Analyte for Calibration	Contiene una lista de los nombres de todos los analitos disponibles en el archivo de calibración externo. Para cada uno de los analitos actuales, seleccione el analito externo correspondiente del que se ha tomado la calibración.

Nota: El mapa de auditoría se añade a la sesión cuando la **Results Table** se crea por primera vez. No se puede cambiar una vez se ha añadido.

Tabla 5-1 Menú Audit Trail

Elemento de menú	Descripción
Audit Trail Viewer	Abre el Audit Trail Viewer .
Audit Map Manager	Selecciona, modifica y activa los Audit Maps .
View Session Audit Map	Abre el mapa actual de la Results Table activa.

Visor de pistas de auditoría

El visor de pistas de auditoría muestra el historial completo de una muestra concreta en la tabla de resultados. Las tablas de resultados se guardan en la carpeta <unidad>:\Analyst Data\Projects\<nombre del proyecto>\Results.

Nota:

La tabla de resultados no debe estar oculta al realizar otras acciones. Por ejemplo, al guardar una pista de auditoría.

Para maximizar otro panel, como el panel de revisión de picos, para ver mejor los datos, utilice el botón **Toggles tab mode** de la barra de herramientas.

Usando el **Audit Trail Viewer**, los usuarios pueden:

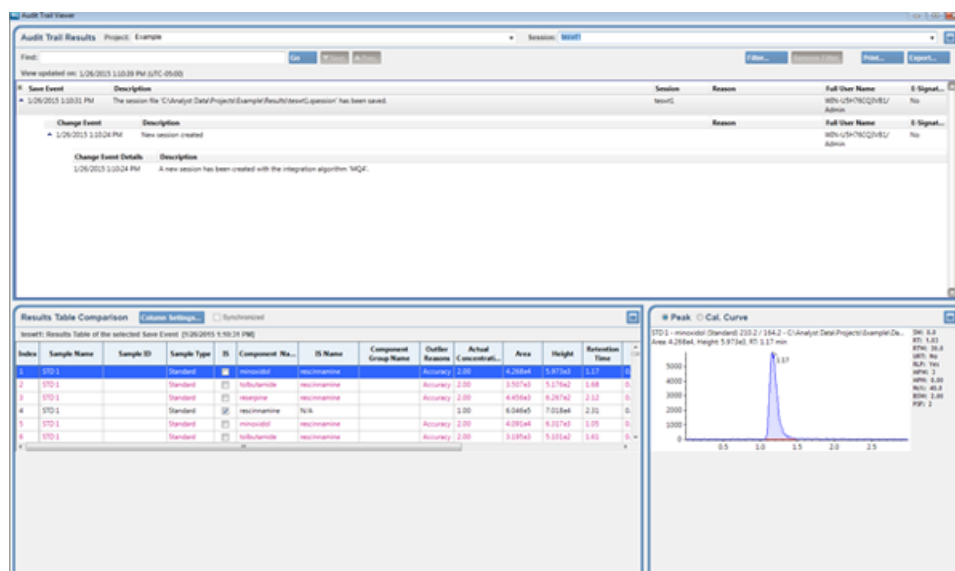
- Ver los registros de pista de auditoría para cada **Results Table**.
- Realizar una búsqueda de palabras clave, que resalta todas las coincidencias del texto.
- Filtrar los eventos auditados en la pista de auditoría del software basándose en un conjunto de criterios especificados.
- Exportar los registros de la pista de auditoría a un archivo txt. Los archivos exportados se pueden editar.
- Imprimir a un PDF seguro.

Ver los resultados de pistas de auditoría en el visor de pistas de auditoría

1. Abra una tabla de resultados.

- Haga clic en **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
- Para cambiar proyectos, haga clic en la lista **Projects** y, a continuación, seleccione otro proyecto.
- Para ver otras sesiones, haga clic en la lista **Sessions** y luego seleccione otra sesión. El usuario puede también elegir visualizar todas las sesiones del proyecto al mismo tiempo.

Figura 5-1 Audit Trail Viewer



Etiqueta	Descripción
Project	Seleccione un proyecto de la lista.
Session	Seleccione un archivo de sesión.
Find	Búsqueda de palabra clave sin filtrar. Resalta cada aparición del texto.
Go	Haga clic para iniciar la búsqueda.
Next	Haga clic para pasar a la siguiente palabra.
Prev	Haga clic para pasar a la palabra anterior.
Filter	Haga clic para mostrar solo los eventos que coincidan con los criterios seleccionados.
Remove Filter	Haga clic para quitar el filtro.
Print	Haga clic para imprimir la pista de auditoría.
Export	Haga clic para exportar la pista de auditoría.
Save Event	Cuando se guarda un archivo de sesión, se crea un evento de guardado. El evento de guardado captura los cambios realizados desde el evento de guardado anterior y cada valor de la Results Table .
Description	Detalles del evento de cambio.

Etiqueta	Descripción
Session	Muestra el nombre del archivo de sesión.
Reason	Muestra el motivo del cambio realizado a la Results Table .
Full User Name	Muestra el nombre del usuario que hizo el cambio en la Results Table .
E-Signature	Indica si se aceptaron los cambios en la Results Table .
Column Settings	Haga clic para mostrar u ocultar columnas en la Results Table .
Synchronized	Seleccione para que ambas Results Table se desplacen horizontalmente al mismo tiempo.
Previous version	Muestra la versión anterior del archivo de sesión seleccionado.
Peak	Haga clic para mostrar el pico de la muestra seleccionada.
Cal Curve	Haga clic para mostrar la curva de calibración de la muestra seleccionada.

Buscar palabras clave

Los usuarios pueden realizar una búsqueda de palabras clave, que resalta todas las coincidencias del texto.

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. En el campo **Find**, escriba la palabra que desea encontrar y luego haga clic en **Go**.

Si se encuentran coincidencias, el campo **Find** cambia a verde, se muestra el número de coincidencias y la palabra queda resaltada en amarillo. Si no se encuentran coincidencias, el campo **Find** cambia a rosa.

4. Utilice los botones **Next** y **Prev** para desplazarse por las correspondencias.

Filtrar eventos auditados

Los usuarios pueden filtrar los eventos auditados en la pista de auditoría basándose en un conjunto de criterios especificados.

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Haga clic en **Filter**.

Figura 5-2 Cuadro de diálogo Filter Audit Trail Events

Elemento	Descripción
1	El nombre del archivo de la Results Table . Se puede filtrar un archivo de la Results Table o todos los archivos de la Results Table del proyecto activo.
2	Description: escriba el tipo de evento parcial o completo. Sample Name: escriba el nombre de la muestra parcial o completo. Full User Name: escriba el nombre parcial o completo del usuario. E-Signature: seleccione sí o no. Reason: escriba el motivo parcial o completo.
3	is: úselo para filtrar por una palabra o expresión específica.
4	contains: úselo para filtrar por una palabra o expresión parcial.
5	Date: úselo para filtrar por eventos que se hayan producido en una fecha u hora específicas.

4. En el cuadro de diálogo **Filter Audit Trail Events**, utilice las listas para seleccionar los criterios de filtrado.

Menú Audit Trail

Nota: El campo Results Table no se puede editar.

5. Haga clic en **Clear** para restablecer los criterios de búsqueda a **No filter**.
6. Haga clic en **OK** para filtrar los eventos.

¡Sugerencia! Para quitar el filtro, en **Audit Trail Viewer** haga clic en **Remove Filter**.

Exportar el visor de pistas de auditoría

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Export** y luego escriba un nombre de archivo.

El archivo se exporta como un archivo de texto separado por marcas de tabulación.

Nota: Solo se exporta la sección de eventos guardada del visor de pistas de auditoría.

Imprimir el visor de pistas de auditoría

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Print** y luego seleccione una impresora.

Los usuarios pueden imprimir un PDF seguro usando pdfFactory.

Nota: Solo se imprime la sección de eventos guardada del visor de pistas de auditoría.

Gestor de pistas de auditoría

El software agrupa los eventos de cuantificación auditados en las pistas de auditoría. Las pistas de auditoría son archivos que almacenan registros de los eventos auditados. Las pistas de auditoría, combinadas con archivos como los archivos wiff, métodos de cuantificación y archivos de la **Results Table**, conforman registros electrónicos válidos que se pueden usar para cumplimiento normativo.

El software **Audit Trail Manager** mantiene todos los eventos según se han definido en el mapa de auditoría. El software captura las firmas electrónicas y las razones, incluyendo el usuario, fecha y detalles de los cambios. También registra información adicional, como comentarios, según el mapa de auditoría.

¡Sugerencia! Un archivo de sesión contiene la **Results Table**, una copia del método de cuantificación, una copia del mapa de auditoría en el momento de su creación y las pistas de auditoría completas para toda la sesión.

Cuando el software crea o modifica un archivo qsession o qmethod, el evento se captura en **Project Audit Trail**, en la pestaña **History** del software Analyst[®] MD. Se capturan los siguientes eventos:

- Creación de un archivo de métodos de cuantificación
- Modificación de un archivo de métodos de cuantificación
- Creación de una **Results Table** de cuantificación.
- Modificación de una **Results Table** de cuantificación.

Si está seleccionado **E-Signature** o **Reason Prompt** para crear o modificar el archivo de método de cuantificación, entonces el cuadro de diálogo **Audit Trail** generado por el software Analyst[®] MD se abre en el software MultiQuant[™] MD.

Tabla 5-2 Pistas de auditoría

Pista de auditoría	Ejemplos de eventos registrados
Pista de auditoría de cuantificación (una por tabla de resultados)	Cambios en: <ul style="list-style-type: none"> • Crear y modificar archivos de sesión. • Información de muestras. • Parámetros de integración de picos.

Acerca de los mapas de auditoría

El software MultiQuant[™] MD mantiene todo el historial de cambios para la información de configuración de procesamiento asociada con los resultados de cuantificación. El software audita todos los eventos según el mapa de auditoría del proyecto activo, y captura todas las firmas electrónicas y las vincula con los registros correspondientes.

Crear un mapa de auditoría

El software instala varios mapas de auditoría. Vea los mapas de auditoría para determinar si modificar uno o varios de ellos es más sencillo que crear uno completamente nuevo. Crear o modificar mapas de auditoría son eventos auditados en la pista de auditoría del proyecto del software Analyst[®] MD.

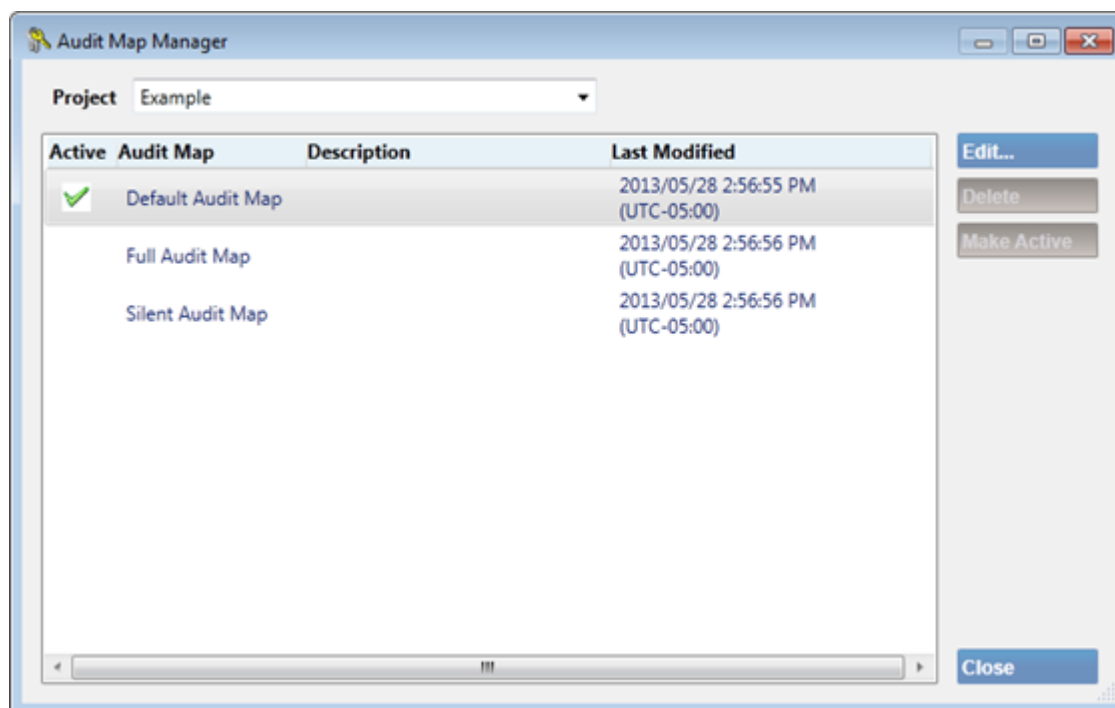
PRECAUCIÓN: Si dos usuarios modifican el mismo mapa de auditoría a la vez, tan solo se utilizarán los cambios realizados por el usuario que haya guardado el archivo por última vez.

El mapa de auditoría activo del proyecto determina qué eventos se registran en la pista de auditoría de todas las **Results Tables** que se crean.

Nota: Después de guardar una **Results Table**, el mapa de auditoría activo se guarda con la **Results Table** y el mapa de auditoría no se puede modificar.

1. Haga clic en **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figura 5-3 Audit Map Manager



Etiqueta	Descripción
Project	Seleccione un proyecto de la lista.
Edit	Haga clic para editar el mapa de auditoría activo.
Delete	Haga clic para eliminar el mapa de auditoría seleccionado.

2. En la lista **Projects**, seleccione un proyecto para el que desee crear un mapa de auditoría.
3. Seleccione un mapa de auditoría y, a continuación, haga clic en **Edit**.

Figura 5-4 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

Etiqueta	Descripción
Description	Escriba una descripción del mapa de auditoría.
Check	Haga clic para seleccionar una casilla de verificación.
Uncheck	Haga clic para deseleccionar la casilla de verificación.
Add Predefined Reasons	Haga clic para añadir una razón predefinida a la lista.

4. Escriba una descripción del mapa de auditoría en el campo **Description** si es necesario.
5. En la tabla **Audit Map**, configure cada evento de la forma siguiente:
 - Para auditar el evento, seleccione la casilla de verificación de la columna **Audited**.

¡Sugerencia! Para rellenar celdas consecutivas en una columna con el valor de la casilla de verificación, pulse **Ctrl** o **Shift**, haga clic en las celdas y luego haga clic en **Check**.

Menú Audit Trail

- Para que los operarios escriban una razón personalizada o escojan una razón predefinida, seleccione la casilla de verificación de la columna **Reason Prompt**.
- Para que los operarios seleccionen solamente una razón predefinida para el cambio cuando se produzca el evento, seleccione las casillas de verificación de las columnas **Reason Prompt** y **Predefined Reason Only**. En las columnas **Predefined Reason** _ , seleccione hasta diez razones.

¡Sugerencia! Para añadir una razón predefinida, haga clic en **Add Predefined Reasons**.

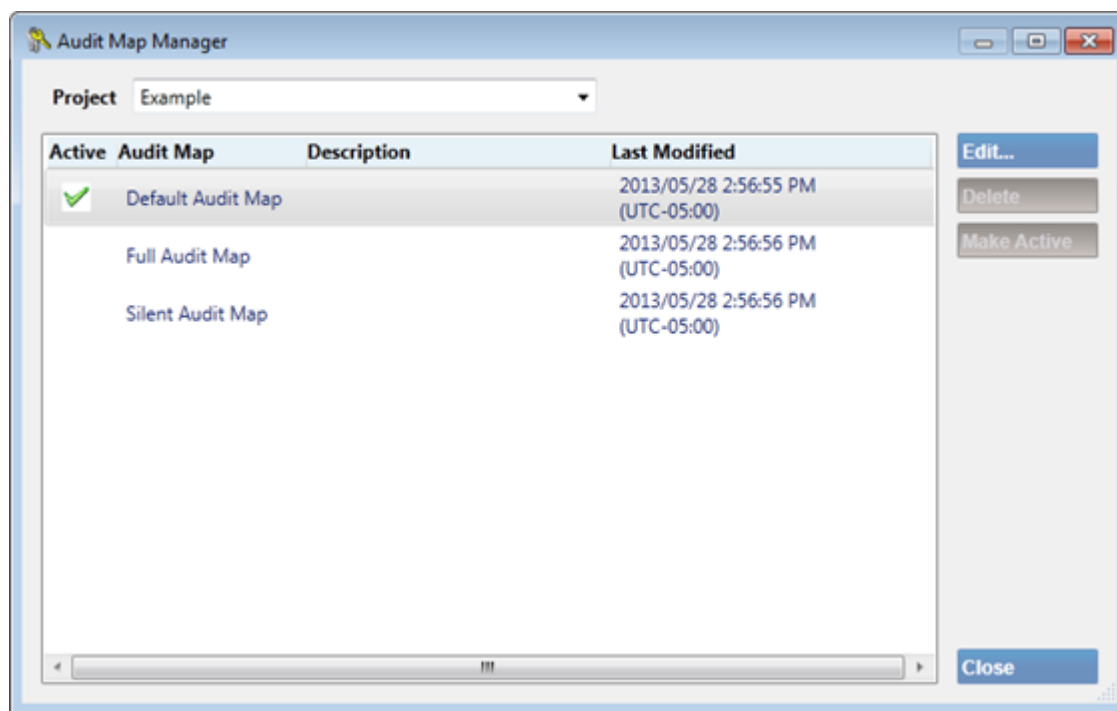
- Para solicitar firmas electrónicas para el evento, seleccione la casilla de verificación en la columna **E-Sign**.
6. Haga clic en **Save As** y luego escriba un nombre en el cuadro de diálogo **Save Audit Map As**.
 7. Haga clic en **Save**.
 8. Haga clic en **Close** del cuadro de diálogo **Audit Map Editor**.
 9. Haga clic en **Make Active**.

Cuando se aplica un mapa de auditoría, este se convierte en el mapa de auditoría activo. La configuración de auditoría del mapa de auditoría activo determina qué eventos se registran en las pistas de auditoría a partir de este punto.

Cambiar el mapa de auditoría

1. Haga clic en **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figura 5-5 Audit Map Manager



Etiqueta	Descripción
Project	Seleccione un proyecto de la lista.
Edit	Haga clic para editar el mapa de auditoría activo.
Delete	Haga clic para eliminar el mapa de auditoría seleccionado.

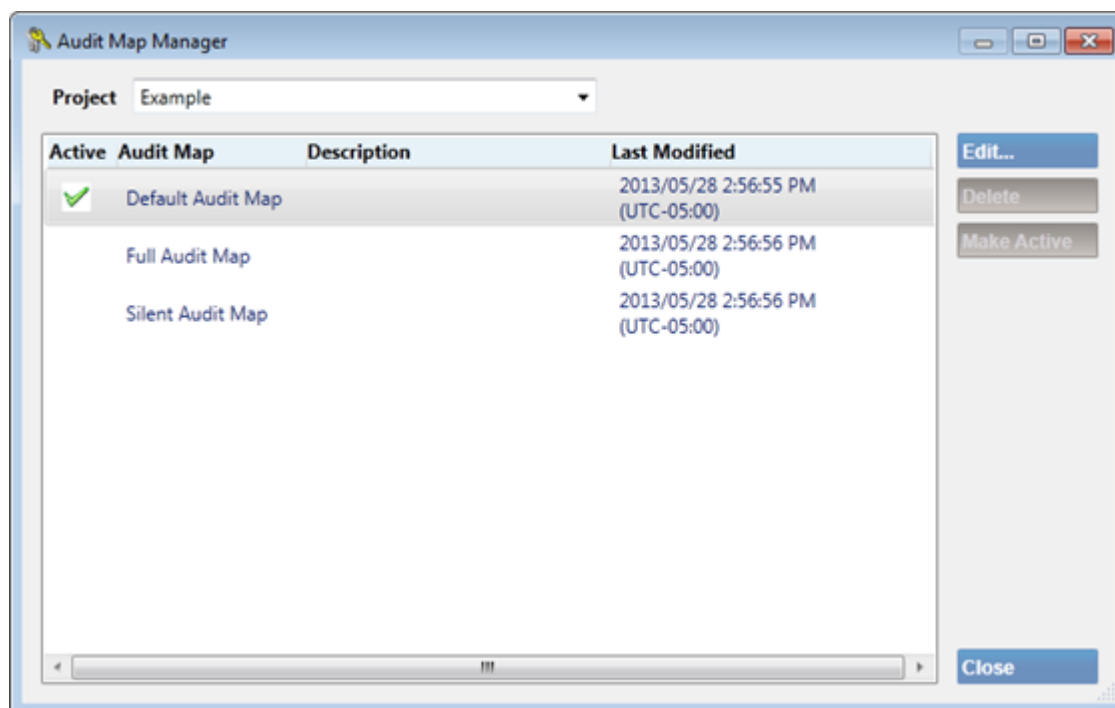
2. En la lista **Project**, seleccione un proyecto para el que desee cambiar el mapa de auditoría.
3. Seleccione otro mapa y luego haga clic en **Make Active**.
4. Haga clic en **Close**.

Edit the Audit Map

Los siguientes eventos de auditoría se registran siempre, y por tanto no se muestran en el **Audit Map Editor**: Print Report, Export Results Table y Transfer to LIMS.

1. Haga clic en **Audit Trail > Audit Map Manager**.

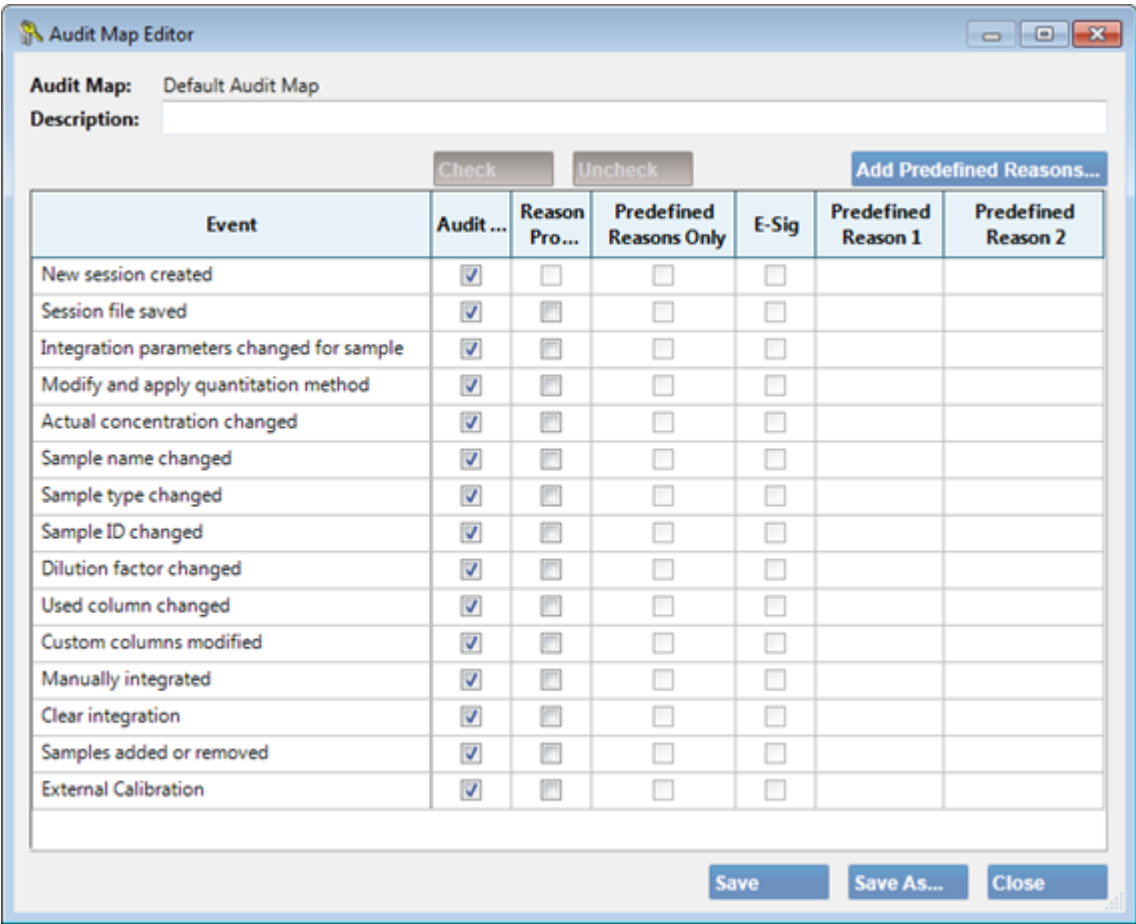
Figura 5-6 Audit Map Manager



Etiqueta	Descripción
Project	Seleccione un proyecto de la lista.
Edit	Haga clic para editar el mapa de auditoría activo.
Delete	Haga clic para eliminar el mapa de auditoría seleccionado.

2. Seleccione un mapa de auditoría y, a continuación, haga clic en **Edit**.

Figura 5-7 Audit Map Editor



Etiqueta	Descripción
Description	Escriba una descripción del mapa de auditoría.
Check	Haga clic para seleccionar una casilla de verificación.
Uncheck	Haga clic para deseleccionar la casilla de verificación.
Add Predefined Reasons	Haga clic para añadir una razón predefinida a la lista.

3. Escriba una descripción del mapa de auditoría en el campo **Description** si es necesario.
4. En la tabla **Audit Map**, configure cada evento de la forma siguiente:
 - Para auditar el evento, seleccione la casilla de verificación de la columna **Audited**.

¡Sugerencia! Para rellenar celdas consecutivas en una columna con el valor de la casilla de verificación, pulse **Ctrl** o **Shift**, haga clic en las celdas y luego haga clic en **Check**.

- Para que los operarios escriban una razón personalizada o escojan una razón predefinida, seleccione la casilla de verificación de la columna **Reason Prompt**.
- Para que los operarios seleccionen solamente una razón predefinida para el cambio cuando se produzca el evento, seleccione las casillas de verificación de las columnas **Reason Prompt** y **Predefined Reason Only**. En las columnas **Predefined Reason** _ , seleccione hasta diez razones.

¡Sugerencia! Para añadir una razón predefinida, haga clic en **Add Predefined Reasons**.

- Para solicitar firmas electrónicas para el evento, seleccione la casilla de verificación en la columna **E-Sign**.
5. Haga clic en **Save**.
 6. Haga clic en **Make Active**.

Cuando se aplica un mapa de auditoría, este se convierte en el mapa de auditoría activo. La configuración de auditoría del mapa de auditoría activo determina qué eventos se registran en las pistas de auditoría a partir de este punto.

Ver la configuración de auditoría integrada

La configuración de auditoría utilizada para una tabla de resultados se integra en la tabla de resultados durante su creación. Esta configuración no se puede cambiar. La marca de tiempo situada junto al nombre del mapa de auditoría indica el momento en que se guardó por última vez el mapa de auditoría para integrar la configuración.

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Figura 5-8 Session Audit Map

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

Audit Map: Default Audit Map Last Modified: 2013/05/28 2:56:55 PM (UTC-05:00)

Description:

Event	Audited	Reason Prom ...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Close

Con excepción del elemento **About**, este menú contiene los elementos que aparecen en la [Tabla 6-1](#). Estos archivos se instalan automáticamente y se pueden encontrar también en la carpeta <unidad>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Los documentos o carpetas, (o accesos directos a ellos) se pueden copiar en esta carpeta de ayuda para que aparezcan automáticamente en el menú.

Tabla 6-1 Menú Help

Elemento de menú	Descripción
Install License	Haga clic para abrir el cuadro de diálogo de activación de MultiQuant™ MD.
Verify Installation	Haga clic para verificar los archivos y la instalación.
Software Reference Guide	Describe las características y funcionalidad del software.
Software Release Notes	Proporciona información sobre el software, así como procedimientos para instalar el software.
About	Muestra la versión del programa, copyright y otra información del programa, junto con información sobre qué funcionalidades de la licencia están instaladas.

Tablas de resultados

7

Una **Results Table** es el punto de partida para la revisión y exportación de datos. Utilice el **asistente New Results Table** o haga clic en **File > New Results Table** para crear una tabla de resultados. Consulte [Cuadros de diálogo de la tabla de resultados en la página 43](#).

Nota: Las columnas **Sample Name** y **Sample ID** no pueden contener: \ / : * ? " < > | =.

La configuración de auditoría utilizada para una **Results Table** se integra en la **Results Table** durante su creación. Esta configuración no se puede cambiar. La marca de tiempo situada junto al mapa de auditoría indica el momento en que se guardó por última vez el mapa de auditoría para integrar la configuración.

Nota: Cuando mueva los datos, mueva todo el proyecto para mantener la estructura de archivos. Si la estructura de archivos y carpetas no se mantiene, no se puede ver una **Results Table** o los cromatogramas.

Existe una fila independiente para cada componente para cada una de las muestras originalmente seleccionadas.

Figura 7-1 Tabla de resultados de ejemplo

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Repetition Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.206e4	5.71e3	1.71	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.225e4	101.16
2	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.975e3	5.176e2	1.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.100e4	104.39
3	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.498e3	6.267e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.890e4	140.21
4	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	4.646e4	7.076e4	2.21	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.381e4	6.317e3	1.68	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.100e4	100.33
6	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.109e3	5.176e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.960e4	148.36
7	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.867e3	6.376e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.530e4	128.68
8	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.953e3	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.170e4	1.084e5	1.64	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.946e4	122.64
10	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.267e3	1.367e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.775e4	179.41
11	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		4.00	6.676e3	9.867e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.221e4	128.91
12	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.903e3	6.276e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.169e4	1.084e5	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.225e4	109.80
14	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		4.00	4.980e3	1.020e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.495e4	111.37
15	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.000e3	1.313e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.467e4	111.68
16	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.817e3	7.026e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.526e5	2.257e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.820e4	97.82
18	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.391e4	2.257e3	1.63	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	7.486e4	107.76
19	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.416e4	1.875e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.073e4	87.47
20	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.717e3	7.326e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.405e4	2.056e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.320e4	104.54
22	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.289e4	1.036e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	6.143e4	107.79
23	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.391e4	1.020e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e4	88.42
24	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.703e3	6.920e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.891e5	4.086e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.099e5	99.96
26	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.884e4	4.176e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.033e5	97.07
27	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.776e4	3.967e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.025e5	98.28
28	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.706e3	6.204e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.927e5	4.186e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.094e5	97.11
30	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.847e4	4.256e3	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.088e5	98.13
31	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.899e4	4.126e3	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.046e5	96.78
32	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.996e3	6.970e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- Las columnas **IS**, **Component Name** e **IS Name** contienen información sobre los analitos.
- La casilla de verificación activada indica el patrón interno para la muestra.
- Seleccione las columnas que se muestran en la **Results Table** utilizando el cuadro de diálogo **Column Settings**. Consulte [Configuración de columna en la página 40](#).
- Cambie el ancho de las columnas arrastrando la línea que separa los dos encabezados de columna. Esta información se guarda automáticamente y se aplica cuando el usuario abre **Results Tables** previamente guardadas.

Tablas de resultados

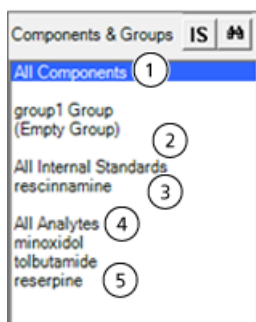
- Cambie el orden de las columnas haciendo clic sobre un encabezado de columna y arrastrándolo a la nueva ubicación. Esta información se guarda automáticamente y se aplica cuando el usuario abre **Results Tables** previamente guardadas.
- Los usuarios pueden limitar la tabla de resultados para que solo muestre las filas que corresponden a patrones internos o analitos particulares. Utilice la barra de herramientas para limitar los tipos de muestras que aparecen. Consulte [Lista de componentes y grupos en la página 38](#) y [Filtro de tipo de muestra en la página 42](#).
- Determinadas operaciones, como la sincronización con el panel **Peak Review**, se aplican a las filas actualmente seleccionadas. Seleccione filas haciendo clic en el área a la izquierda de la primera columna.

Lista de componentes y grupos

Cuando está abierta una **Results Table**, se muestra una lista de componentes y grupos actuales a la izquierda de la ventana principal. Utilice esta lista para cambiar los componentes que se pueden ver en la **Results Table** y en cualquier panel **Peak Review** o gráfico **Calibration**.

Los componentes se definen como una transición única o rango de masas. Un grupo se define como el nombre del grupo al que pertenece el componente.

Figura 7-2 Lista Components & Groups



Elemento	Etiqueta	Descripción
1	All Components	Haga clic para ver todos los analitos y patrones internos en la Results Table , así como la Peak Review y Calibration correspondientes, si se muestran.
2	All Internal Standards	Haga clic para ver todos los patrones internos y ocultar todos los analitos. Esta opción no está presente si no hay patrones internos definidos.
3	Specific Internal Standards	En esta lista aparece el nombre de cada patrón interno independiente. Haga clic en una de estas opciones para ver dicho patrón interno y ocultar todos los demás componentes.

Elemento	Etiqueta	Descripción
4	All Analytes	Haga clic para ver todos los analitos y ocultar todos los patrones internos. Este elemento no está incluido si no hay patrones internos definidos.
5	Specific Analytes	El nombre de cada analito independiente aparece en la lista. Haga clic en uno de estos elementos para ver ese analito y ocultar todos los demás componentes.

Haga clic en un elemento individual de la lista para mostrar solo los componentes de dicho elemento. Pulse **Shift** o **Ctrl** para seleccionar múltiples elementos. Esto es útil para visualizar, por ejemplo, solo dos analitos específicos. Utilice las teclas de flecha hacia arriba y abajo cuando la lista esté activa para desplazarse por las opciones.

¡Sugerencia! Puede hacer que la lista sea más ancha o más estrecha arrastrando el extremo derecho del panel hacia la derecha o la izquierda.

El orden real de las filas en la tabla de resultados no se ve afectado al filtrar. La tabla de resultados está preconfigurada para quedar ordenada primero por muestra y luego por componente, en el orden indicado en el método de cuantificación. Sin embargo, la tabla también se puede ordenar en un orden específico, como se describe en [Iconos del software en la página 157](#).

Menú contextual de la tabla de resultados

Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 7-1 Opciones del menú contextual de la tabla de resultados

Opción de menú	Descripción
Column Settings	Utilice este comando para editar las columnas de la Results Table . Los cambios se aplican solo a la Results Table actual, a menos que se guarden como predeterminados del proyecto.
Add Custom Column	Agrega una columna editable nueva a la tabla. Rellene la columna escribiendo directamente en las celdas o pegando contenido. Se puede introducir cualquier texto, como comentarios o los resultados de cálculos personalizados.
Rename Custom Column	Renombra una columna personalizada existente. Antes de usar este comando, haga clic en el encabezado personalizado para seleccionar la columna personalizada.
Remove Custom Column	Utilícelo para borrar una columna personalizada existente. Antes de usar este comando, haga clic en el encabezado de columna para seleccionar la columna personalizada.

Tabla 7-1 Opciones del menú contextual de la tabla de resultados (continuación)

Opción de menú	Descripción
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Proporciona un acceso directo para configurar el campo Actual Concentration para todos los analitos de muestras del tipo Standard si hay más de un analito y todos los analitos están presentes en estas muestras en la misma concentración. Consulte Aplicar concentraciones reales del analito actual a todo en la página 40 .
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Parecida a Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All , excepto porque se aplica a los patrones internos en lugar de a los analitos.
Set 'Used'	Utilice este comando para realizar una cuantificación absoluta para determinar si una muestra Standard determinada se debe utilizar en el cálculo de la curva de calibración para un analito dado. Los dos primeros elementos se utilizan para seleccionar o borrar el campo Used para las filas que están seleccionadas actualmente en la Results Table . Los elementos tercero y cuarto son parecidos, excepto porque la operación se aplica a todos los analitos para cualquier muestra correspondiente a una fila seleccionada.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Utilice este comando para borrar la integración de picos de las filas actualmente seleccionadas.

Aplicar concentraciones reales del analito actual a todo

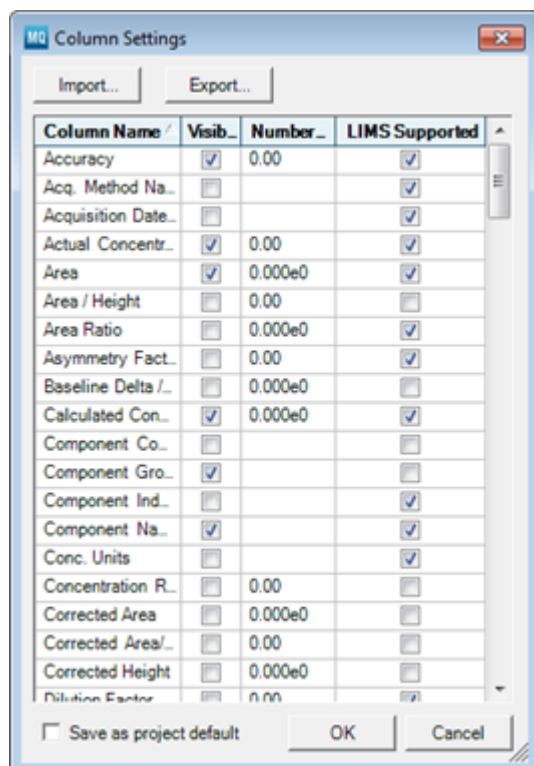
1. Utilice la [Lista de componentes y grupos en la página 38](#) para limitar la tabla y que muestre solo un analito determinado.
2. Opcionalmente, utilice el **Sample Type Filter** para ver solo muestras **Standard**. Consulte [Filtro de tipo de muestra en la página 42](#).
3. Especifique las concentraciones reales del analito, bien escribiendo directamente en las celdas, bien seleccionando la columna y luego seleccionando **Paste** si las concentraciones están disponibles en otra parte en formato texto.
4. Haga clic en **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Vuelva a la visualización de todos los componentes y todos los tipos de muestra según sea necesario.

Configuración de columna

Si los nombres de la columna están truncados, mueva el cursor por encima del campo para que aparezca el nombre de la columna en la información sobre herramientas.

Para los campos numéricos, utilice el formato 0.00 para notaciones no científicas y el formato 0.00e0 para notaciones científicas. Cambie los puntos decimales para indicar la precisión de los números que se muestran. Solo se pueden utilizar un punto (.) como separador de decimales. No se admite la agrupación de dígitos.

Figura 7-3 Cuadro de diálogo Column Settings



Campo	Descripción
Import	Haga clic para seleccionar un archivo de configuración de columna guardado anteriormente usando Export . Los campos del cuadro de diálogo se actualizan para utilizar la información del archivo seleccionado.
Export	Haga clic para guardar la configuración de cuadro de diálogo actual en un archivo. Esto permite al usuario cambiar entre diferentes configuraciones de columnas.
Column Name	Muestra el nombre de las columnas en orden alfabético. Consulte Columnas de la tabla de resultados en la página 54 .
Visible	Selecciónelo para hacer la columna visible. Si no, la columna está oculta.
Number Format	Para los campos numéricos, utilice el formato 0.00 para notaciones no científicas y el formato 0.00e0 para notaciones científicas. Para la precisión que se muestra, cambie las posiciones decimales.

Tablas de resultados

Campo	Descripción
LIMS Supported	Las filas en las que aparece seleccionado LIMS Supported están predefinidas por el LIMS y las selecciones de columnas no se pueden cambiar.
Save as project default	Seleccione esta opción para usar la configuración de las columnas en las futuras tablas de resultados.

Filtro de tipo de muestra

Tabla 7-2 Descripciones del filtro de tipo de muestra

Tipo de filtro	Descripción
All Sample Types	Muestra todos los tipos de muestras.
Unknowns	Presenta solo las muestras Unknown, que son muestras normales de concentración desconocida. Cuando se usan muestras Standard, su concentración se calcula retrospectivamente a partir de la curva de calibración y se registra en tabla de resultados como Calculated Concentration. Consulte Ecuaciones de regresión en la página 128 .
Standards	Presenta solo las muestras de concentración conocida. Estas muestras se utilizan para la creación de la curva de calibración.
Quality Controls	Presenta solo las muestras de Quality Control. Estas muestras de concentración conocida se usan para comprobar la precisión de la curva de calibración, pero no influyen en su construcción real.
Standards & QCs	Presenta muestras Standard y Quality Control.
Unknowns, Standards & QCs	Presenta muestras Unknown, Standard y Quality Control.
Blanks	Muestra solo muestras Blank. Se trata habitualmente de muestras que contienen compuestos de patrón interno, si se utiliza, pero no analitos, y que han pasado el procedimiento de preparación de muestras normal. Estas muestras no se utilizan en la generación de la curva de calibración. Para incluirlas, seleccione el tipo de muestra Standard y, a continuación, establezca la Actual Concentration en 0.
Double Blanks	Presenta solo muestras Double Blank. Se trata de muestras sin patrones internos ni analitos.
Solvents	Presenta solamente muestras Solvent. Se trata de blancos dobles que no han pasado el procedimiento de preparación de muestras normal.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Presenta todos los tipos de muestras de blanco: Blank, Double Blank y Solvent.

Ver filas ocultas

En la **Results Table**, para cualquier componente dado, solo se muestran las filas para aquellas muestras para las que la transición de MRM correspondiente esté disponible. Las filas sin usar, componentes con transiciones no disponibles para una muestra dada, están presentes en la tabla, pero están ocultas de forma predeterminada.

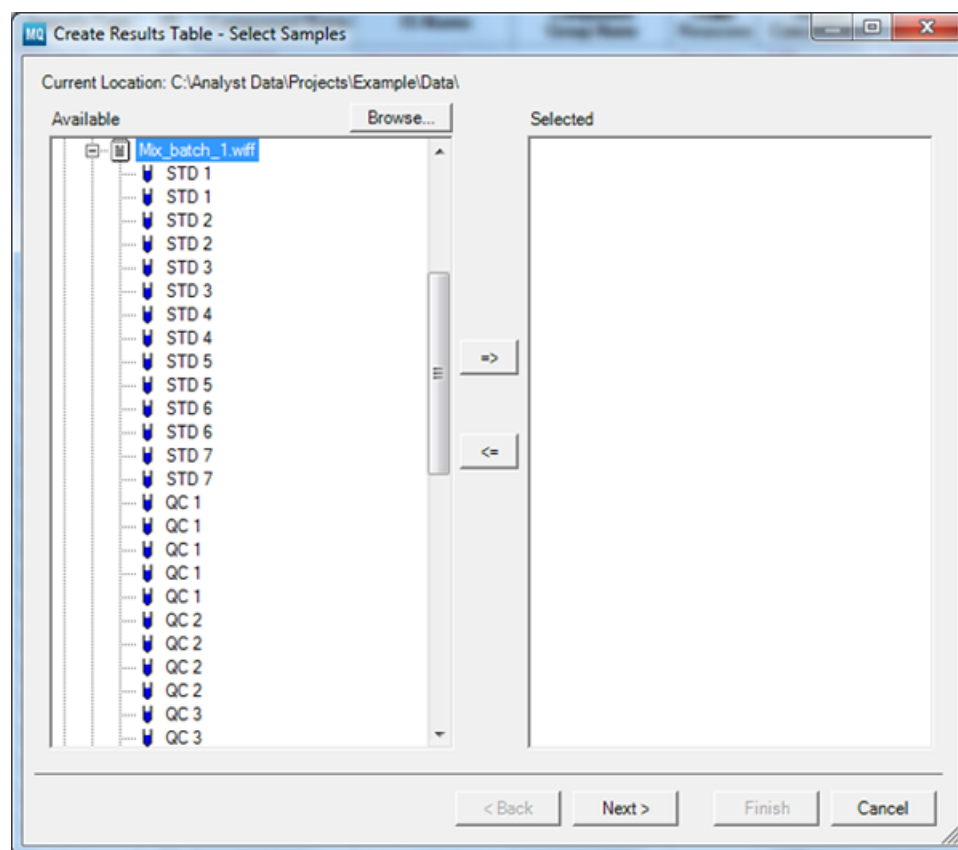
1. Muestre la columna **Peak Comment** en la **Results Table** si no está ya visible.
2. Ordene la tabla usando esta columna.
3. Seleccione las filas (ahora adyacentes) con el comentario **Not Present**.
4. Haga clic en el icono **Hide selected row(s)**. Consulte [Iconos del software en la página 157](#).

Cuadros de diálogo de la tabla de resultados

Select Samples

Seleccione las muestras de los archivos wiff para procesarlas.

Figura 7-4 Página Create Results Table - Select Samples



Tablas de resultados

- El panel **Available** muestra las subcarpetas, archivos wiff y muestras disponibles en la carpeta **Data** para la carpeta seleccionada.
- Expanda las carpetas individuales para ver todas las subcarpetas o archivos wiff. Si se expande el archivo wiff, se abre para ver las muestras disponibles.
- Utilice las flechas para agregar o quitar muestras.
- Seleccione las muestras haciendo doble clic en una muestra individual, seleccionando una muestra o archivos de datos y luego haciendo clic en el botón =>, o arrastrando una muestra o archivo de datos desde el panel izquierdo hasta el derecho. Pulse **Shift** o **Ctrl** para seleccionar múltiples archivos o muestras antes de moverlos.

Select Method

Seleccione el método de cuantificación. Si se selecciona un método existente pero no se edita, entonces se muestra una barra de progreso mientras se procesan las muestras seleccionadas. Al final de este proceso, se crea una **Results Table**.

Figura 7-5 Página Create Results Table - Select Method

MQ Create Results Table - Select Method

Select an existing quantitation method or create a new method now.

☒ Choose Existing Method

Method Name:

☐ Edit Method

☐ Create New Method (MQ4)

Method Name:

Etiqueta	Descripción
Choose Existing Method	Haga clic en Open para seleccionar un método de cuantificación existente.
Edit Method	Seleccione este comando para editar un método existente. Las páginas siguientes del asistente se rellenan con la información del método existente, que se puede modificar si se necesita.
Create New Method	Haga clic en New para crear un método de cuantificación. El algoritmo entre paréntesis es el algoritmo seleccionado en el cuadro de diálogo Integration Defaults .

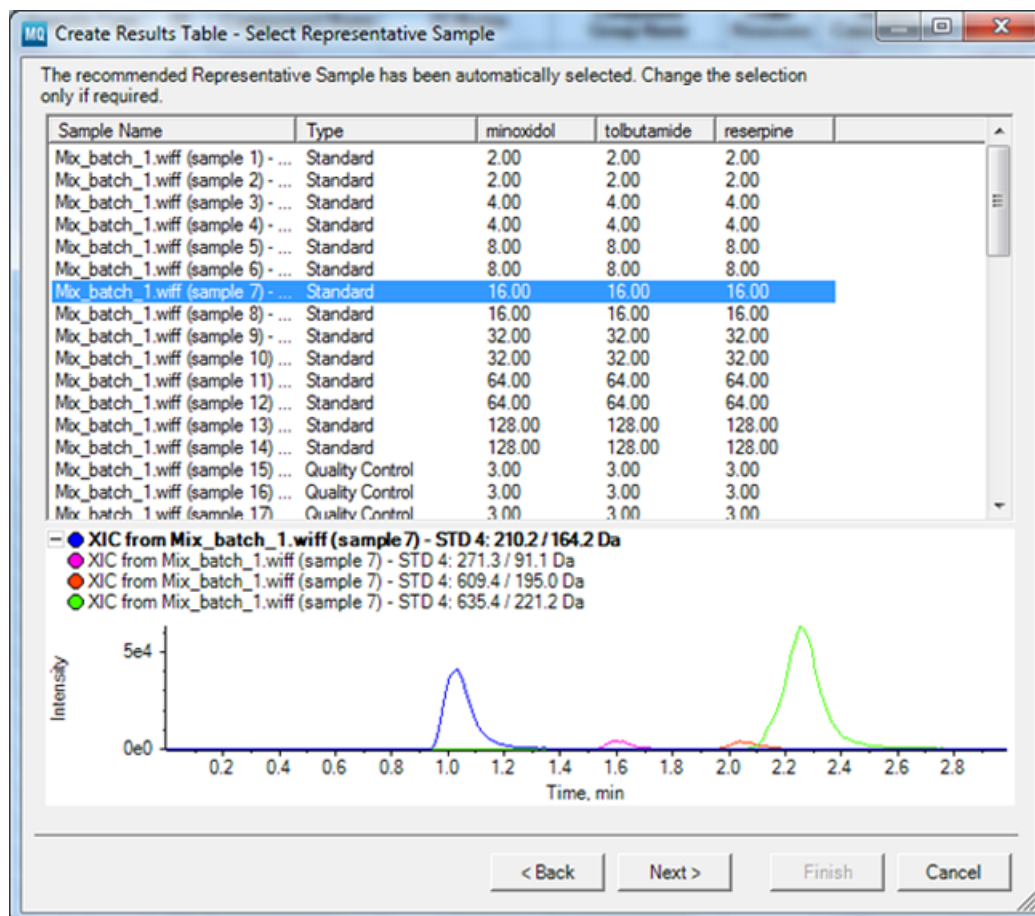
Select Representative Sample

En la página **Select Representative Sample** aparece la muestra representativa seleccionada, para la que se muestran los cromatogramas cuando se configuran visualmente los parámetros de la búsqueda de picos y de integración. Esta muestra debe contener todos los compuestos que se incluirán en el método de cuantificación.

Si se seleccionaron los tipos de muestra y concentraciones de analitos usando el editor de lotes del software Analyst[®] MD antes de adquirir las muestras, entonces esta información se muestra en forma de columnas adicionales.

El software selecciona una muestra de forma predeterminada. Si la muestra seleccionada no es adecuada, seleccione otra muestra representativa. Si se selecciona el algoritmo SignalFinder[™], para evitar generar un modelo de integración incorrecto, el software recomienda una muestra no representativa si el nivel TIC está por encima de 1,0e6 en todas las muestras. Los usuarios pueden seleccionar una muestra representativa manualmente en esta situación.

Figura 7-6 Página Create Results Table - Select Representative Sample



Define Components

La página **Define Components** contiene una fila por cada analito o patrón interno. Seleccione los nombres de los analitos y patrones internos, si se usan. Consulte [Menú contextual de definición de componentes en la página 48](#).

Figura 7-7 Página Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: **MRM (4 transitions)**

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

Etiqueta	Descripción
Experiment	Seleccione de la lista un experimento para procesar. Para datos de varios periodos o varios experimentos, seleccione cada uno de los experimentos que hay que procesar y luego rellene la tabla con los componentes para el experimento correspondiente.
Row	Contiene el número de fila actual.
IS	Indica si el componente definido para la fila es un analito (no seleccionado) o un patrón interno (seleccionado).
Name	Contiene el nombre del componente. Para experimentos de MRM, el nombre se rellena automáticamente usando las masas de transición Q1/Q3 . Para un nombre más específico, escriba un nombre en el campo.
Group	<p>Contiene el nombre del grupo al que pertenece el componente para la fila. Si los analitos o patrones internos que están relacionados entre sí se colocan en el mismo grupo, luego se pueden revisar y manipular juntos más fácilmente. Esto se aplica a componentes que tienen el mismo tiempo de retención, por ejemplo, diferentes transiciones de MRM para el mismo compuesto.</p> <p>Escriba los nombres del grupo o rellénelos automáticamente. Consulte Menú contextual de definición de componentes en la página 48.</p>

Tablas de resultados

Etiqueta	Descripción
IS Name	Contiene el nombre del patrón interno opcional que se debe usar para el analito definido para la fila. Este campo no se aplica a los patrones internos en sí.
Mass Info	<p>Para experimentos de MRM, esta columna se titula Q1/Q3 y contiene el par de masa para el componente definido para la fila. Seleccione la transición necesaria de la lista que muestra todas las transiciones disponibles para el experimento. Normalmente, la columna se inicializa automáticamente con las transiciones disponibles.</p> <p>Para experimentos de perfil (análisis), esta columna se titula Start - Stop y contiene el rango de masas usado para calcular un XIC (cromatograma de iones extraídos) para el componente definido para la fila. Escriba el rango de masas con un guion separando las dos masas. Por ejemplo, 200-201 o 200-1. Para la última opción, el rango de masas es 199,5-200,5.</p>

Menú contextual de definición de componentes

Haga clic con el botón derecho en la página **Define Components** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 7-3 Opciones del menú contextual de definición de componentes

Opción de menú	Descripción
Clear	Borra el contenido de las filas o columnas seleccionadas. Las filas se seleccionan haciendo clic o arrastrando sobre el área que hay antes de los números de fila.
Copy	Copia las filas o columnas seleccionadas al portapapeles.
Paste	Pega el contenido del portapapeles.
Find Component by Name	<p>Selecciona el componente cuyo nombre (Name) coincide con el texto. No es necesario el texto exacto para encontrar una coincidencia. Esto es útil si hay muchos componentes y el usuario desea seleccionar rápidamente uno específico.</p> <p>Si inicialmente no hay seleccionada una fila en la hoja de cálculo, la búsqueda comienza desde la primera fila; de lo contrario la búsqueda comienza a partir de la fila seleccionada y vuelve al principio. Esto resulta útil si hay más de un componente cuyo nombre contiene el texto. Si en la primera búsqueda no se encuentra el componente, busque de nuevo, dejando el primer componente seleccionado para localizar otra coincidencia en la tabla.</p>
Insert Row Above	Inserta una fila vacía inmediatamente encima de la fila seleccionada actualmente.
Delete Selected Rows	Elimina las filas seleccionadas actualmente de la tabla.
Sum Multiple Ions	Suma cromatogramas para varias transiciones de MRM o intervalos de masa de análisis completo. Una vez seleccionado el comando, se añaden otras columnas de masa a la tabla Components . Todas las masas seleccionadas para una fila dada se utilizan en la construcción de los XIC sumados para el analito o patrón interno correspondiente. Es recomendable dejar esta función siempre seleccionada.

Tabla 7-3 Opciones del menú contextual de definición de componentes (continuación)

Opción de menú	Descripción
Groups	Consulte Submenú de grupos en la página 85 .
Internal Standards	Consulte Submenú de patrones internos en la página 87 .

Define Integration

Seleccione el tiempo de retención esperado y otros parámetros de búsqueda de picos para cada uno de los componentes.

La lista de la izquierda muestra una entrada para cada componente definido en la página anterior del asistente. Haga clic en una fila específica para ver el cromatograma correspondiente y la integración actual para la muestra representativa. Desplácese por la lista usando las teclas de flechas arriba y abajo o usando la rueda de desplazamiento. En general, se recomienda revisar todos los componentes para una integración correcta. Sin embargo, si hay muchos componentes, entonces utilice el comando **Highlight Components with Uncertain RT** para limitar el número que hay que revisar.

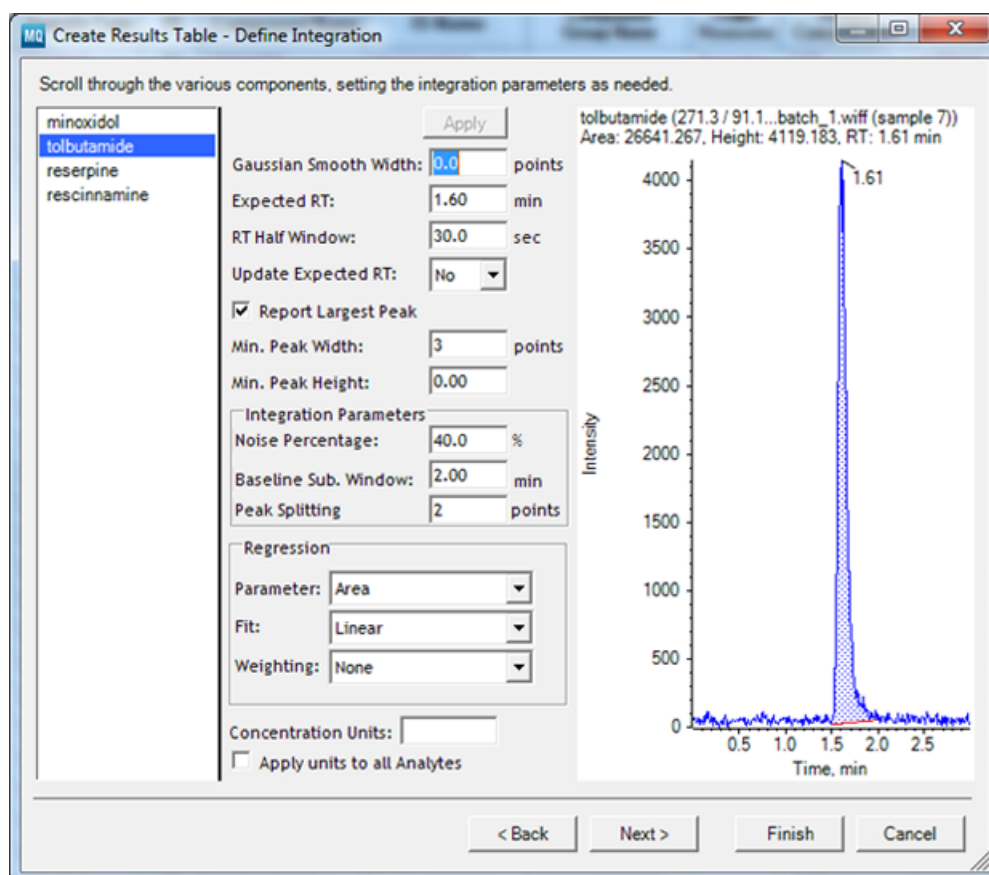
Nota: Si hay más de unos pocos componentes, entonces asegúrese de que los parámetros para buscar picos están configurados razonablemente de forma predeterminada antes de ejecutar el asistente, para evitar tener que ajustar los parámetros para cada componente.

Haga clic con el botón derecho en la página para ver los comandos disponibles. Consulte [Menú contextual de definición de integración en la página 51](#).

En el grupo **Regression**, cambie las opciones de calibración para todos los componentes seleccionados después de crear la tabla de resultados. Configure las unidades de concentración por defecto y los parámetros de regresión de forma que no haya necesidad de ajustarlos cada vez.

¡Sugerencia! Aumente el zoom en el gráfico arrastrando las regiones del eje x o y. Vuelva a la vista preestablecida usando el menú contextual (**Home Graph Axes**) o haciendo doble clic en la región del eje.

Figura 7-8 Página Create Results Table - Define Integration



Etiqueta	Descripción
Apply	Ajuste los parámetros de búsqueda de picos, si es necesario, para un componente concreto. Cuando cree la nueva tabla de resultados, los parámetros especificados para un componente dado se aplican a dicho componente para todas las muestras cuando se integran los datos. Consulte Parámetros del algoritmo de integración en la página 122 .
Expected RT	Configurado inicialmente como el tiempo de retención del punto con la intensidad más alta del cromatograma. Usualmente este es el pico requerido. Sin embargo, si están presentes isómeros, entonces podría ser necesario ajustar este valor. Para ajustar el valor, escriba un valor nuevo en el campo Expected RT y luego haga clic en Apply . Alternativamente, haga clic en el gráfico y luego arrastre a través del pico de interés. Tenga cuidado de no arrastrar involuntariamente el cursor en el gráfico y así ajustar el tiempo de retención esperado.
Parameter	Seleccione Area o Height .
Fit	Los distintos tipos de ajuste se describen en Ecuaciones de regresión en la página 128 .

Etiqueta	Descripción
Weighting	Los distintos tipos de ponderación se describen en Factores de ponderación en la página 129 .
Concentration Units	Escriba las unidades de concentración usadas para los analitos y cualquier patrón interno. Si se realiza cuantificación relativa, entonces deje este campo en blanco. El asistente asume que se utilizan las mismas unidades para todos los componentes. Si no es el caso, entonces utilice el Quantitation Method Editor .
Apply units to all Analytes	Los usuarios pueden escribir una unidad de concentración para los componentes individuales. Para aplicar la misma unidad a todos los componentes, seleccione esta casilla de verificación. La información tiene que ser consistente con las Concentration Units .

Menú contextual de definición de integración

Haga clic con el botón derecho en la pestaña **Define Integration** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 7-4 Opciones del menú contextual de definición de integración

Opción de menú	Descripción
Find Component by Name	Parecido al comando disponible en la pestaña Define Components , salvo que en lugar de seleccionar filas de la hoja de cálculo de Components , se seleccionan elementos individuales en la lista de componentes.
Highlight Components with Uncertain RT	Se utiliza para resaltar aquellos componentes para los que el tiempo de retención esperado predeterminado (tomado como el tiempo de retención del pico con la mayor intensidad para cada cromatograma) es incorrecto. Si hay solo unos pocos componentes, revise cada uno de ellos individualmente y no utilice este comando. Sin embargo, si hay muchos componentes, utilice este comando para comprobar visualmente solo aquellos para los que haya más de un pico significativo en el cromatograma. Consulte Cuadro de diálogo Highlight Components en la página 89 .
Home Graph Axes	Devuelve el gráfico ampliado a la vista inicial, donde todos los datos son visibles.

Tabla 7-4 Opciones del menú contextual de definición de integración (continuación)

Opción de menú	Descripción
Overlay Other Components for Group	<p>Utilice este comando para superponer cromatogramas si se han asignado varios componentes a grupos, y si se espera que todos los componentes asignados a un grupo dado tengan el mismo tiempo de retención. Por ejemplo, si representan diferentes transiciones de MRM del mismo compuesto real.</p> <p>Cuando está seleccionada esta opción, el cromatograma para el componente actual, cuya integración se está definiendo, se representa utilizando un trazo azul sólido y se muestra su área de picos integrada. Los cromatogramas, y no el área de picos integrada, se superponen para los demás componentes del mismo grupo utilizando una línea discontinua.</p>
Update Retention Times	<p>Se utiliza para restablecer los tiempos de retención para un método de cuantificación creado anteriormente. Si se abre un método de cuantificación existente y se selecciona Set New Typical Sample, los cromatogramas mostrados se corresponden con la nueva muestra, pero los tiempos de retención esperados no se ven afectados.</p> <p>Para cada componente, se actualiza el tiempo de retención esperado para que se corresponda con el tiempo de retención del pico con la intensidad más alta dentro de una ventana de la anchura especificada centrada en el tiempo de retención esperado original.</p> <p>Consulte Cuadro de diálogo Update Retention Times en la página 90.</p>

Outlier Settings

Los usuarios pueden marcar con un indicador la precisión de los **Standards**, **QCs**, **Ion Ratio** y **Calculated Concentration**. Están disponibles los siguientes comandos.

Figura 7-9 Cuadro de diálogo Outlier Settings

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std): %

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

Component	IS	Group	Ion Ratio Tolerance (%)	Lower Limit of Calculated Conce..	Upper Limit of Calculated Conce..
minoxidol	<input type="checkbox"/>	Group A			
tolbutamide	<input type="checkbox"/>	Group A	20		
reserpine	<input type="checkbox"/>				
rescinnamine	<input checked="" type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

Etiqueta	Descripción
Accuracy for Standards	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Modifica la tolerancia de precisión para las muestras Standard con un valor que sea consistente con los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifica la tolerancia de precisión para el Standard de concentración más baja si el procedimiento de funcionamiento estándar de su laboratorio indica una tolerancia diferente para este Standard .
Accuracy for QCs	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Quality Control .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Quality Control con un valor que sea consistente con los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio.
Ion Ratio	Solo disponible si los componentes están asignados a grupos. Seleccione si desea utilizar la proporción de iones del área del pico o de la altura del pico. El área del pico o la altura del pico se configuran al seleccionar el parámetro de regresión durante el desarrollo del método de cuantificación.

Tablas de resultados

Etiqueta	Descripción
Calculated Concentration	Al utilizar muestras Standard de una concentración conocida, este es el cálculo retrospectivo de su concentración a partir de la curva de calibración. Las ecuaciones de regresión describen cómo se realiza la regresión para los distintos tipos de regresión y ponderación.
Component	Los analitos o patrones internos para todas las muestras.
IS	El patrón interno seleccionado. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Group	Los componentes que tienen el mismo tiempo de retención (es decir, transiciones diferentes para el mismo compuesto) pueden agruparse. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Ion Ratio Tolerance (%)	Utilice la configuración predeterminada o edite este ajuste conforme a los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Lower Limit of Calculated Concentration	Escriba el límite inferior del rango de concentración aceptable. Cualquier muestra con una Calculated Concentration con un valor inferior a este se marca como un valor atípico de concentración.
Upper Limit of Calculated Concentration	Introduzca el límite superior del rango de concentración aceptable. Cualquier muestra con una Calculated Concentration con un valor superior a este se marca como un valor atípico de concentración.

Haga clic con el botón derecho en la página **Outlier Settings** para acceder a un menú contextual.

Tabla 7-5 Opciones del menú contextual de configuración de valores atípicos

Etiqueta	Descripción
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Aplica el límite inferior de la concentración calculada a todos los analitos si todos tienen los mismos criterios.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Aplica el límite superior de la concentración calculada a todos los analitos si todos tienen los mismos criterios.

Columnas de la tabla de resultados

Nota: Algunas columnas críticas de la información de la muestra, como **Sample Name**, **Sample ID**, entre otras, no deben ocultarse cuando los usuarios personalizan la configuración de las columnas de la **Results Table**.

Para los campos numéricos, utilice el formato 0.00 para notaciones no científicas y el formato 0.00e0 para notaciones científicas. Cambie los puntos decimales para indicar la precisión de los números que se muestran. Solo se pueden utilizar un punto (.) como separador de decimales. No se admite la agrupación de dígitos.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados

Etiqueta	Descripción
Accuracy	Si se utilizan muestras Standard de concentración conocida, para muestras Standard y Quality Control , esto se define como: $100 \% * (\text{concentración calculada})/(\text{concentración real})$ Para otros tipos de muestras, el valor es N/A.
Acq. Method Name	El nombre del método de adquisición utilizado para adquirir la muestra.
Acquisition Date & Time	La fecha y la hora a la que se adquirió la muestra wiff.
Actual Concentration	Para muestras Standard y Quality Control , esta es la concentración conocida esperada.
Area	El área de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Area / Height	El área de pico detectada se divide entre la altura. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Area Ratio	Para los analitos que utilizan un patrón interno, esta es la proporción entre Area e IS Area . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor es N/A.
Asymmetry Factor	La distancia desde la línea central del pico y la pendiente posterior dividida entre la distancia desde la línea central del pico y la pendiente frontal, con todas las mediciones realizadas al 10 % de la altura máxima del pico.
Baseline Delta / Height	El valor absoluto de la diferencia de altura de la línea de referencia (al inicio del pico y al final del pico) y la altura real del pico. Valores superiores a aproximadamente 0,1 indican que la línea de referencia podría no haberse integrado correctamente y que debe revisarse el pico.
Calculated Concentration	Al utilizar muestras Standard de una concentración conocida, este es el cálculo retrospectivo de su concentración a partir de la curva de calibración. Consulte Ecuaciones de regresión en la página 128 para obtener información sobre cómo se efectúa la regresión para los distintos tipos de regresión y ponderación.
Component Comment	Un comentario arbitrario que se aplica al analito o patrón interno para todas las muestras.
Component Group Name	El nombre del grupo (si está presente) asociado con el analito o patrón interno.
Component Index	El índice del analito o patrón interno en el método de cuantificación original. Puede ser útil para ordenar la tabla a partir de este campo.
Component Name	El nombre del analito o patrón interno.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Conc. Units	Las unidades de concentración.
Concentration Ratio	Para los analitos que utilizan un patrón interno, se trata de la proporción entre Actual Concentration e IS Actual Concentration . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor es N/A.
Corrected Area	El área de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Corrected Area / Height	El área de pico detectada se divide entre la altura. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Corrected Height	La altura de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Dilution Factor	El factor por el que se ha diluido la muestra. Este factor se utiliza en el cálculo de la curva de calibración. Consulte Ecuaciones de regresión en la página 128 .
End Time	El tiempo de retención final del pico detectado, en minutos.
End Time at 10%	El tiempo en minutos a lo largo de la cara posterior del pico donde la intensidad es el 10 % de la altura del pico.
End Time at 5%	El tiempo en minutos a lo largo de la cara posterior del pico donde la intensidad es el 5 % de la altura del pico.
Expected Ion Ratio	La proporción de iones esperada para todos los tipos de muestras.
Expected RT	El tiempo de retención esperado original del método de cuantificación, en minutos.
Height	La altura de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor es N/A.
Height Ratio	Para los analitos que utilizan un patrón interno, se trata de la proporción entre Height e IS Height . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor es N/A.
Index	Es el índice del analito de la fila en el orden original sin clasificar. Si la tabla se ordena por otra columna, puede restaurarse al orden original clasificándola por esta columna.
Injection Volume	El volumen de la muestra inyectado por el procesador de muestras automático, en ml.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> Un valor Baseline indica que se ha integrado un pico independiente de la forma usual. Un valor Valley indica que había dos picos adyacentes y que la señal no volvió al valor de la línea de referencia entre ellos. Un valor Manual indica que el pico se integró manualmente. Un valor N/A indica que no se ha detectado ningún pico.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> Las proporciones de iones se determinan cuando se han registrado al menos dos transiciones de MRM de un único analito en un grupo. El primer componente de un subgrupo se utilizará como iones de Quantifier. El resto de componentes del subgrupo se utilizarán como iones de Qualifier. Proporción de iones = (Área de pico o altura de cualificador)/(área de pico o altura de cuantificador) Subgrupos <ul style="list-style-type: none"> Todos los analitos de un grupo constituyen un subgrupo de Analyte. Todos los patrones internos de un grupo constituyen un subgrupo de IS. Si un componente no es miembro de un grupo, la Ion Ratio es N/A. Si no se detecta el pico, la Ion Ratio es N/A. Se aplica a todos los componentes en los subgrupos Analyte e IS, para el Quantifier, el Qualifier es él mismo. Si la integración cambia bien para los picos del Quantifier o el Qualifier, se vuelve a calcular la Ion Ratio. Puede calcularse tanto para el área como la altura del pico. Si el Area se utiliza para la parte de regresión de un .qmethod para el primer componente (el índice del componente es 1) en la Results Table, el área del pico se utilizará para el cálculo de la Ion Ratio para la Results Table completa. Si la Height se utiliza en la regresión del primer componente, la altura del pico se utiliza para el cálculo.
IS	Una casilla de verificación seleccionada indica que el componente para la fila es un patrón interno y no un analito.
IS Actual Concentration	Concentración real para el patrón interno asociada con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Area	El área para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Area / Height	La proporción del área con la altura para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Baseline Delta / Height	Línea de referencia delta/altura para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Comment	Un comentario arbitrario para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
IS Corrected Area	El área corregida para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Corrected Area / Height	Área corregida/altura corregida para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Corrected Height	Altura corregida para el patrón interno asociada con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS End Time	Tiempo final para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Expected RT	Tiempo de retención esperado para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Height	Altura para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Integration Type	Tipo de integración para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Mass Info	Información de masa para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Name	Nombre del componente para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Peak Comment	Comentario del pico para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Quality	Calidad para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Region Height	Métrica de calidad para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Retention Time	Tiempo de retención para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Signal / Noise	Relación señal/ruido para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Start Time	Tiempo de inicio para el patrón interno asociado con el analito actual o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Total Width	Anchura total para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.
IS Width at 50%	Anchura al 50 % para el patrón interno asociado con el analito actual, o N/A para los patrones internos o para analitos sin un patrón interno.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Mass Info	Información de masa asociada con el componente. Para experimentos MRM es Q1/Q3 y para experimentos de perfil (análisis completo) es Start - Stop .
Modified	Una marca de verificación indica que los parámetros de búsqueda de picos se han modificado con el panel Peak Review respecto a sus valores originales indicados en el método de cuantificación.
Operator Name	El nombre del operador del instrumento que adquirió la muestra.
Original Filename	El nombre del archivo wiff.
Outlier Reasons	<p>Cuando se han definido los criterios para los valores atípicos en el método de cuantificación, esta columna indica qué criterio se ha encontrado fuera de los límites predeterminados para el componente.</p> <p>La columna Outlier Reasons solo está vinculada a Outlier Settings en el método de cuantificación y es una columna predefinida en la Results Table.</p> <p>Razón por la que el valor atípico está marcado con un indicador:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion Ratio Si hay un pico para el cuantificador pero no para el cualificador, se marcará la proporción de iones para ambos componentes. Si hay un pico para el cualificador pero no para el cuantificador, se marcará la proporción de iones para ambos componentes. Si ninguno tiene picos, no se marca ninguno de los componentes. • No se puede calcular la proporción de iones esperada.
Peak Comment	Un comentario arbitrario para la fila.
Plate Number	Número de placa del procesador de muestras automático, de acuerdo con la indicación original en el Batch Editor utilizado para adquirir los datos.
Points Across Baseline	El número de exploraciones desde el comienzo hasta el fin del pico.
Points Across Half Height	El número de exploraciones a lo largo del pico a aproximadamente el 50 % de la altura.
Quality	<p>Esta métrica trata de indicar la calidad del pico integrado.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Los valores cercanos a cero indican que el pico se ha integrado pobremente (o que no existe pico real). • Los valores cercanos a 1,0 indican que el pico se integró bien y que no necesita revisión.
Rack Number	Número de estante del procesador de muestras automático, de acuerdo con la especificación original en el Batch Editor utilizado para adquirir los datos.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Region Height	La altura de pico del pico más grande próximo al pico real detectado. Esto es útil en conjunción con el campo Quality . Los picos con una baja calidad que tienen también una Region Height razonable, necesitan revisarse. Si la Region Height es pequeña, entonces no hay pico significativo presente.
Relative RT	Para los analitos que utilizan un patrón interno, se trata de la proporción entre el Retention Time y el IS Retention Time . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor es N/A.
Retention Time	El tiempo de retención real del pico detectado, en minutos.
Sample Comment	Un comentario arbitrario para la muestra.
Sample ID	Un identificador arbitrario para la muestra. Se inicia desde el valor especificado originalmente en el Batch Editor utilizado para la adquisición de datos.
Sample Index	El índice de la muestra actual.
Sample Name	Un nombre arbitrario para la muestra. Se inicia desde el valor especificado originalmente en el Batch Editor utilizado para la adquisición de datos.
Sample Type	El tipo de la muestra. Consulte Filtro de tipo de muestra en la página 42 .
Signal / Noise	Una estimación de la proporción entre la altura del pico para el pico detectado y el ruido presente en el cromatograma. Cuando se utiliza el algoritmo de integración SignalFinder, se estima el ruido usando el ruido relativo calculado y la línea de referencia en la posición del ápice del pico. El algoritmo de integración MQ4 utiliza un enfoque similar, salvo en que la línea de referencia se estima usando el cromatograma completo. Consulte Cálculos de ruido relativo y relación señal/ruido en la página 152 .
Slope of Baseline	Indica la desviación de la línea de referencia.
Start Time	El tiempo de retención de inicio del pico detectado, en minutos.
Start Time at 10%	El tiempo en minutos a lo largo de la cara frontal del pico donde la intensidad es el 10 % de la altura del pico.
Start Time at 5%	El tiempo en minutos a lo largo de la cara frontal del pico donde la intensidad es el 5 % de la altura del pico.
Tailing Factor	La distancia desde la pendiente frontal del pico hasta la pendiente posterior, dividida entre el doble de la distancia desde la línea central del pico hasta la pendiente frontal, con todas las mediciones realizadas al 5 % de la altura máxima del pico.
Total Width	La anchura cromatográfica del pico, en minutos, en la línea de referencia.

Tabla 7-6 Columnas de la tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Used	Para muestras Standard , una marca de verificación indica que el analito correspondiente se utiliza actualmente para la construcción de la curva de calibración. Para muestras Quality Control , una marca de verificación indica que el analito se utiliza para el cálculo de las estadísticas de QC . Para otros tipos de muestras, este campo es solo para fines informativos.
Vial Number	Número de vial del procesador de muestras automático, de acuerdo con la especificación original en el Batch Editor utilizado para adquirir los datos.
Width at 10%	La anchura del pico medida al 10 % de la altura del pico.
Width at 5%	La anchura del pico medida al 5 % de la altura del pico.
Width at 50%	La anchura cromatográfica del pico, en minutos, del pico detectado medido en la mitad de la intensidad de su ápice.

Revisión de picos

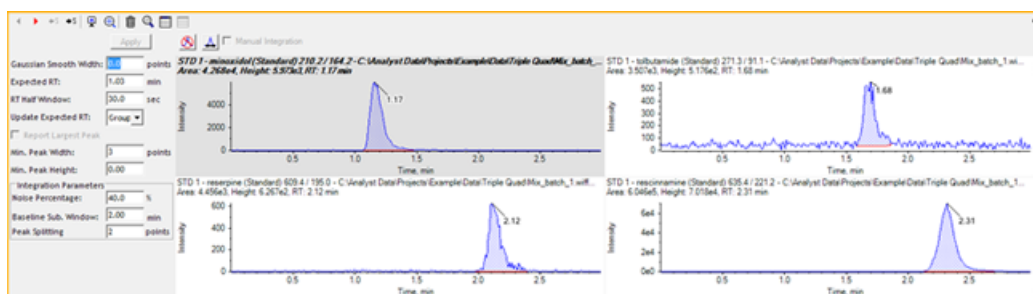
8

Utilice el panel **Peak Review** para inspeccionar visualmente los cromatogramas sin procesar, de forma que se puede determinar la calidad del proceso de detección de picos. Cuando haya una **Results Table** activa, haga clic en el icono **Show Peak Review** de la barra de herramientas de la tabla de resultados para abrir el panel de revisión de picos. Los revisores deberían revisar los datos cuantitativos de acuerdo con los criterios de integración de picos y aceptación de datos en sus propios procedimientos de funcionamiento estándar (SOP).

No se admite la agrupación de números. Los usuarios no deben agrupar números en cuadros de texto (por ejemplo, parámetros de integración) y cuadrículas (por ejemplo, **Results Tables**).

Una **Peak Review** mejorada indica la aceptación de la **Ion Ratio** en un cromatograma superpuesto. Los usuarios pueden agrandar también un único cromatograma.

Figura 8-1 Panel de revisión de picos



Utilice el panel **Peak Review** para corregir cromatogramas que no se han integrado correctamente mediante el ajuste de los parámetros de detección de picos o la selección manual de los puntos de inicio y fin para la integración. Una vez que se ha integrado un cromatograma, la **Results Table** se actualiza automáticamente con la nueva área de picos y otros parámetros.

Los métodos de cuantificación incluyen un conjunto de criterios que se utilizan para cuantificar los picos seleccionados para su integración. Los revisores deberían revisar los datos cuantitativos de acuerdo con los criterios de integración de picos y aceptación de datos en sus propios SOP

Integración manual

Después de integrar manualmente un pico en un cromatograma en particular, seleccione esta casilla de verificación para indicar que el cromatograma se integró manualmente. Cuando está en este estado, si el usuario deselecciona la casilla de verificación se cancela la integración manual del pico y el pico se reintegra automáticamente utilizando los parámetros del método.

La diferencia entre esta casilla de verificación y el botón **Enable Manual Integration Mode** es que esta casilla de verificación refleja el estado del pico actual, mientras que el botón especifica el comportamiento cuando se arrastra un cromatograma.

Nota: Después de habilitar el modo de integración manual, permanece habilitado para todos los paneles hasta que se deselecciona.

Apply

Si el usuario ha ajustado alguno de los parámetros de búsqueda de picos, entonces estará habilitado el botón **Apply**. Haga clic en el botón para aplicar los parámetros de búsqueda de picos modificados al cromatograma activo.

Exceptuando en el modo de integración manual, arrastrar a través de un pico en particular en el cromatograma equivale a ajustar el parámetro **Expected RT** y luego hacer clic en **Apply**.

Nota: Si el usuario modifica los parámetros de búsqueda de picos y luego activa un cromatograma diferente sin hacer clic en **Apply**, entonces los parámetros no se aplican y los cambios se pierden.

Sugerencias para revisar picos

- Ordene la **Results Table** en una columna particular y revise únicamente aquellos cromatogramas que están ordenados en la parte superior o inferior de la tabla.
- El panel **Peak Review** siempre se sincroniza con la **Results Table** correspondiente y muestra los cromatogramas para los mismos picos, en el mismo orden que se encuentran en la **Results Table**. Cualquier cambio (como ordenar filas, filtrar tipos de muestras o seleccionar componentes) realizado en la **Results Table** se refleja automáticamente en el panel **Peak Review**.
- Seleccione el número de cromatogramas que desea visualizar a la vez.
- Utilice la barra de desplazamiento situada a la derecha del panel para desplazarse por los cromatogramas disponibles. Cuando el panel **Peak Review** esté activo, utilice las teclas de flecha hacia arriba y abajo del teclado o la rueda de desplazamiento para desplazarse a lo largo de los cromatogramas.
- En cualquier momento, se considera que un cromatograma particular está activo si el título está en negrita. Active un determinado cromatograma haciendo clic en cualquier punto dentro de él.
- Cuando un cromatograma pasa a estar activo, los parámetros de integración mostrados a la izquierda del panel se actualizan para reflejar el cromatograma que acaba de activarse. Si el usuario ajusta los parámetros de integración de picos y posteriormente hace clic en **Apply**, esto afectará al cromatograma activo actualmente.
- Seleccione una fila en la **Results Table** haciendo clic en la zona gris a la izquierda de la primera columna para mostrar el pico correspondiente en el panel **Peak Review**. Si el usuario se desplaza a un cromatograma particular del panel **Peak Review**, se resalta la fila correspondiente en la **Results Table** y después se visualiza.
- Si el usuario arrastra el ratón por un pico particular dentro de un cromatograma, se actualizará el parámetro **Expected RT** con el tiempo de retención real del pico. El nuevo tiempo de retención se aplica automáticamente y el pico vuelve a integrarse, actualizando la **Results Table**.

Revisión de picos

- Si el usuario está revisando picos en el modo de integración manual, entonces al arrastrar sobre el pico, se integrará el pico seleccionado.
- El proceso de revisión de picos se puede hacer más rápidamente almacenando en caché los cromatogramas previamente calculados. Consulte [Menú Edit en la página 15](#).

Menú contextual de la revisión de picos

Estas funciones controlan el aspecto de los parámetros de integración que figuran a la izquierda de los cromatogramas. Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

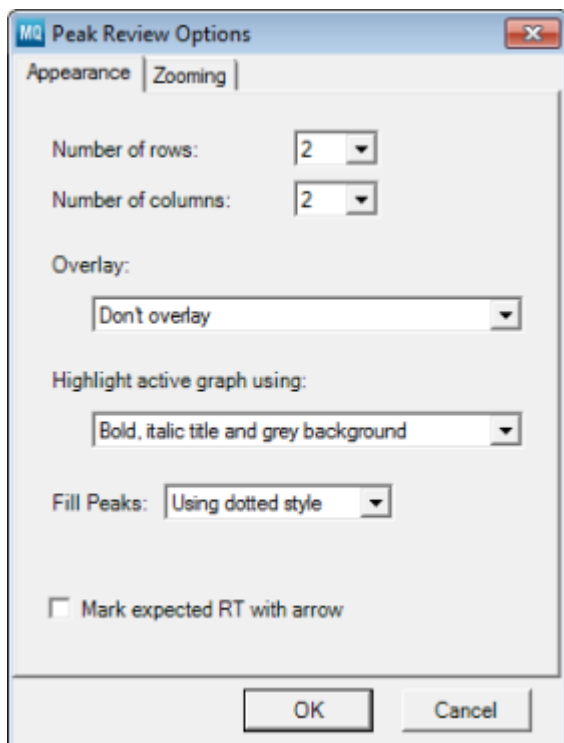
Tabla 8-1 Parámetros de revisión de picos

Tarea	Comandos
Cambiar al aspecto del panel Peak Review .	Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Appearance en la página 65 o bien Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Zooming en la página 67 .
Definir el formato del título de la revisión de picos.	Configurar formato de título de revisión de picos en la página 68 .
Mostrar los parámetros con nombres descriptivos para los parámetros individuales.	De manera predeterminada, Show Parameters-Normal Width está siempre activado.
Copiar los parámetros.	Copiar parámetros en la página 69 .
Pegar los parámetros.	Pegar parámetros en la página 69 .
Establecer el pico como «Not Found».	Configurar pico como no encontrado en la página 70 .
Utilizar el pico.	Usar pico en la página 70 .
Actualizar el método de cuantificación para el componente.	Actualizar el método de cuantificación para el componente en la página 70 .
Actualizar el método de cuantificación para el grupo.	Actualizar el método de cuantificación para el grupo en la página 70 .
Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro del grupo.	Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro del grupo en la página 71 .
Revertir el pico al método original.	Revertir el pico al método original en la página 71 .
Revertir todos los picos del componente	Revertir todos los picos del componente en la página 71 .

Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Appearance

Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** para seleccionar y ajustar las opciones que afectan a la apariencia del panel **Peak Review**. Se recomienda no configurar más de cuatro filas y cuatro columnas.

Figura 8-2 Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Appearance

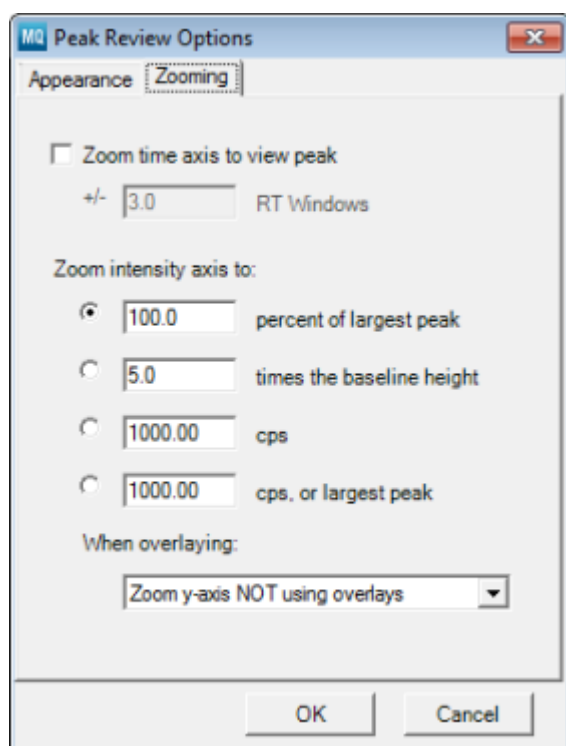


Etiqueta	Descripción
Number of rows y Number of columns	Controlan el número de cromatogramas que se ven simultáneamente. A menos que los cromatogramas ya se hayan guardado en caché, se tardará más en desplazarse entre páginas si aparecen muchos cromatogramas. Consulte Menú Edit en la página 15 .
Overlay	<p>Determina si otros cromatogramas se deben superponer sobre el cromatograma principal en cada uno de los paneles secundarios.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Don't Overlay: evita la superposición de otros cromatogramas. • All components for group: superpone todos los cromatogramas para componentes del mismo grupo que el componente principal (para la muestra actual). • Analytes and IS's separately for group: parecida a la opción anterior, excepto porque en lugar de superponer todos los componentes del mismo grupo, los analitos y los patrones internos permanecen separados. • Internal Standard with Analyte: para los analitos, se superpone al patrón interno que utiliza el analito (los propios cromatogramas del patrón interno no tienen otras superposiciones). • Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines: muestra las líneas de proporción de iones. Seleccione esta opción para visualizar la aceptación de la proporción de iones en la Results Table. Los usuarios pueden ver la aceptación de la proporción de iones cuando hay grupos definidos en el método de cuantificación. Sin embargo, las Ion Ratio Lines son solo indicativas de la aceptación, no son el resultado final. Las líneas se muestran en el cromatograma como la altura del pico, pero se calculan a partir del área o altura del pico, dependiendo de la configuración definida en el método de cuantificación. Si hay discrepancia entre la altura y el área, entonces el usuario debe confirmar el valor atípico de Ion Ratio en la Results Table.
Highlight active graph using:	Indica cómo se debe mostrar el cromatograma actualmente activo. Configúrelo para utilizar el título en negrita y cursiva, y el fondo en gris.
Fill peaks	<p>Indica cómo se deben mostrar los picos del área integrada. Las opciones son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Use a dotted style as used in the screen captures in this document. • Use a solid style. • Use no fill. In all cases the baseline for the peak is also drawn (in red). <p>Cuando se utiliza la tercera opción, solo se representa la línea de referencia y el pico no se rellena.</p>
Mark expected RT with arrow	Indica el Expected Retention Time con una flecha azul bajo el eje de tiempo. Esto puede ser útil para determinar si el pico integrado está cerca del RT previsto.

Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Zooming

Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** para seleccionar y ajustar las opciones que afectan a la apariencia del panel **Peak Review**. Las funciones de **Zoom intensity axis to** se usan para ajustar automáticamente el eje y los cromatogramas.

Figura 8-3 Cuadro de diálogo Peak Review Options: pestaña Zooming



Etiqueta	Descripción
Zoom time axis to view peak	Si está seleccionado, el eje x de los cromatogramas se ajusta automáticamente de forma que solo se ve una parte del ciclo completo. Es útil para ciclos de LC largos, de modo que la región de interés se pueda ver más claramente. La anchura de la ventana se expresa en términos de un múltiplo del parámetro de integración de la ventana de tiempo de retención. La anchura total de la región ampliada es dos veces el número especificado de múltiplos de la RT Window .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Se utiliza para ajustar el eje y de los cromatogramas. Escala el eje y al porcentaje especificado del pico más grande dentro del rango de x visible del cromatograma. Este será más pequeño que la longitud del ciclo de LC total si se utiliza la función para ampliar el eje de tiempo para ver el pico.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Se utiliza para ajustar el eje y de los cromatogramas. Se utiliza para centrarse en la propia región de la línea de referencia.
Zoom intensity axis to cps	Escala el eje y directamente al valor especificado..

Revisión de picos

Etiqueta	Descripción
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Escala el eje y al valor más pequeño especificado o el pico más grande.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Mantiene la configuración del eje de intensidad de ampliación para la sección utilizando solo el conjunto de datos principal. Esta configuración puede provocar que las superposiciones solo se vean parcialmente si son más intensas que el conjunto de datos principal.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Utiliza el conjunto de datos principal y todas las superposiciones, y utiliza el mayor valor de y global. Esta función siempre muestra las superposiciones.
When overlaying Use a percentage y-axis	Escala el conjunto de datos principal y las superposiciones por separado utilizando una escala porcentual. Esto hace que cada trazo utilice toda la altura disponible. Sin embargo, las alturas de pico relativas no se pueden comparar visualmente de forma directa.

¡Sugerencia! Haga doble clic en el eje y para escalar el eje al pico más intenso dentro de todo el conjunto de datos.

Cuando está seleccionado, el cromatograma para el pico que se está revisando se representa utilizando un trazo azul sólido y se muestra su área de picos integrada. Los cromatogramas (no el área de picos integrada) se superponen para los demás componentes (para la misma muestra) utilizando una línea discontinua.

Cuando el gráfico muestra superposiciones de este modo, haga doble clic en cualquier parte del área de título para alternar entre mostrar los títulos para todos los cromatogramas o solo para el activo.

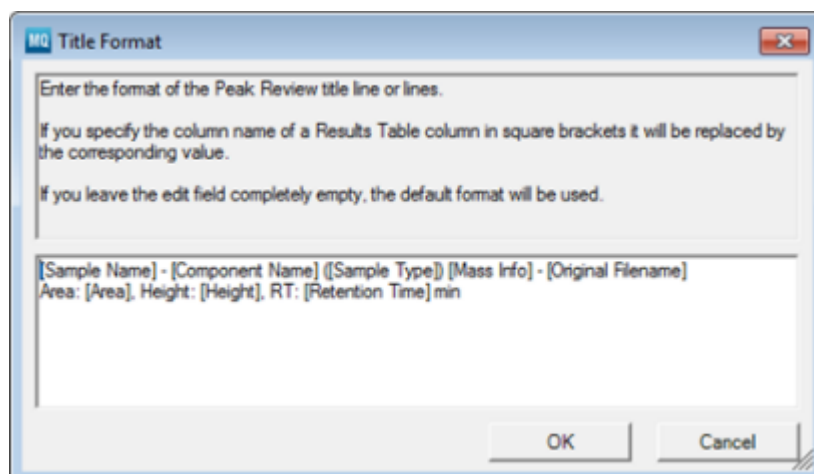
¡Sugerencia! Haga doble clic en el eje x para devolver el gráfico a su vista inicial en la que se ven todos los datos. Amplíe arrastrando dentro del eje para seleccionar un rango de tiempo.

Configurar formato de título de revisión de picos

Utilice el cuadro de diálogo para personalizar la información que se muestra en el título de un gráfico para cada cromatograma. Si el usuario escribe un nombre de columna en la **Results Table** dentro de corchetes, este se reemplaza por el valor del campo de la muestra y componente actuales. El usuario puede también escribir cualquier texto adicional que se dejará tal cual. Se recomienda incluir el nombre de la muestra [Sample Name] en el título de la revisión de picos.

- Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** y luego haga clic en **Set Peak Review Title Format**.

Figura 8-4 Cuadro de diálogo Title Format



Copiar parámetros

Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** para acceder a este comando. Utilice este comando en conjunción con **Paste Parameters** para copiar los parámetros de búsqueda de picos de un cromatograma a otro. Este comando se puede usar si se necesita hacer el mismo ajuste a los parámetros para varios cromatogramas.

1. En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione **Copy Parameters**.
2. Utilice el comando **Update Quantitation Method for Component** para aplicar el cambio a todos los cromatogramas para el componente.

Pegar parámetros

1. En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione **Copy Parameters**.
2. Haga clic con el botón derecho en un cromatograma distinto y luego haga clic en **Paste Parameters**.

Los parámetros copiados anteriormente se aplican al nuevo cromatograma.

Configurar pico como no encontrado

- En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho en el cromatograma y luego haga clic en **Set Peak to 'Not Found'** para quitar la integración del cromatograma seleccionado.

Usar pico

- En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, haga clic en **Use Peak** para incluir o excluir el pico activo de la curva de calibración.

Actualizar el método de cuantificación para el componente

Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma particular, seleccione esta función para ajustar la copia del método de cuantificación guardado con la tabla de resultados con el fin de utilizar dichos parámetros para el componente.

- Ajuste los parámetros de búsqueda de picos, haga clic con el botón derecho y luego clic de nuevo en **Update Quantitation Method for Component**.

Para el componente particular, se integran automáticamente todas las muestras para utilizar los nuevos parámetros y se actualizan el panel **Peak Review** y la **Results Table**. Si algún pico se ha integrado manualmente, se le pregunta al usuario si la reintegración debe aplicarse a todos los picos o solo a aquellos que no se integraron de forma manual.

Actualizar el método de cuantificación para el grupo

Similar a **Update Quantitation Method for Component**, salvo que la integración se aplica a todos los componentes que pertenecen al mismo grupo que el componente del cromatograma activo actualmente. Si el usuario ha asignado los diferentes componentes a grupos y si se espera que los componentes asignados a cualquier grupo dado tengan el mismo tiempo de retención, esta función resulta útil para que el usuario pueda restablecer los parámetros, incluyendo el tiempo de retención esperado, para todos los componentes

del grupo a la vez. Esta función no es de utilidad si los componentes para los grupos no tienen los mismos tiempos de retención.

- Ajuste los parámetros de búsqueda de picos, haga clic con el botón derecho y luego clic de nuevo en **Update Quantitation Method for Group**.

Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro del grupo

Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, utilice esta función para aplicar los parámetros originales de la copia del método de cuantificación guardado con la tabla de resultados en el cromatograma.

- Una vez ajustados los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

Revertir el pico al método original

Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, utilice esta función para aplicar los parámetros originales de la copia del método de cuantificación guardado con la **Results Table** en el cromatograma.

- Haga clic con el botón derecho y luego clic en **Revert Peak to Original Method**.

Revertir todos los picos del componente

Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para algunos cromatogramas, utilice esta función para aplicar los parámetros originales de la copia del método de cuantificación guardado con la **Results Table** en todos los cromatogramas para el mismo componente que el cromatograma activo. Si algún pico se ha integrado manualmente, se le pregunta al usuario si la reintegración debe aplicarse a todos los picos o solo a aquellos que no se integraron de forma manual.

- Haga clic con el botón derecho y luego haga clic en **Revert All Peaks for Component**.

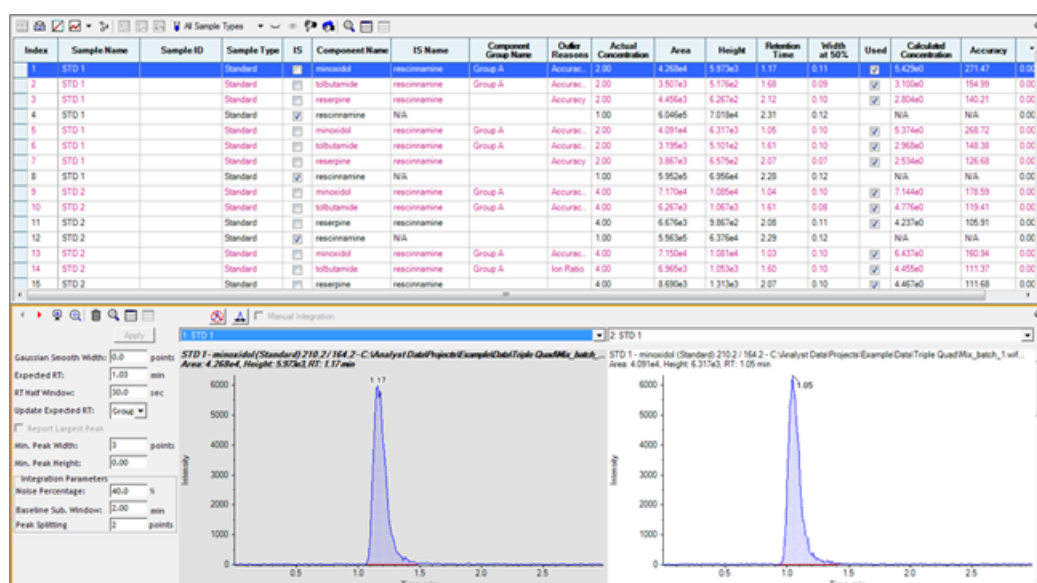
Revisión de las muestras una al lado de otra

9

Utilice la función **Side-by-side Sample Review** para filtrar compuestos objetivo concretos. Los usuarios pueden seleccionar hasta seis muestras para comparar las respuestas de pico a través de las muestras. Los revisores deberían revisar los datos cuantitativos de acuerdo con los criterios de integración de picos y aceptación de datos en sus propios procedimientos de funcionamiento estándar (SOP).

Cuando haya una **Results Table** activa, haga clic en el icono **Side-by-side Sample Review** de la barra de herramientas de la **Results Table** para abrir el panel **Side-by-side Sample Review**.

Figura 9-1 Panel de revisión de las muestras una al lado de otra



Los métodos de cuantificación incluyen un conjunto de criterios que se utilizan para cuantificar los picos seleccionados para su integración. Los revisores deberían revisar los datos cuantitativos de acuerdo con los criterios de integración de picos y aceptación de datos en sus propios SOP

Realizar una revisión de las muestras una al lado de otra

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en el icono **Side by Side Sample Review**.
3. Seleccione una muestra de la lista en el panel **Side by Side Sample Review**.

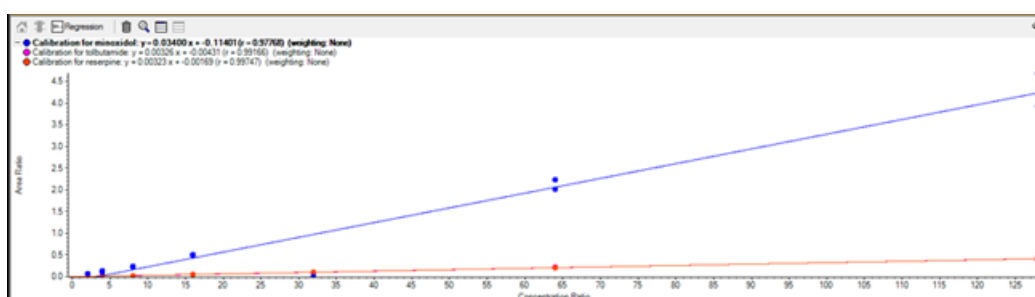
Aparecen los parámetros de integración.

¡Sugerencia! Haga clic con el botón derecho en **Side by Side Sample Review** y luego haga clic en **Options** para cambiar el número de filas o columnas de la revisión una al lado de otra.

4. Seleccione otra muestra de la otra lista.

Utilice el panel **Calibration** para inspeccionar visualmente la regresión para cada analito, si se usan muestras **Standard** de una concentración conocida. El panel no se puede aplicar si el usuario está realizando cuantificación relativa y no tiene muestras **Standard**. Cuando una **Results Table** esté activa, haga clic en **Show Calibration** en la barra de herramientas.

Figura 10-1 Panel de calibración

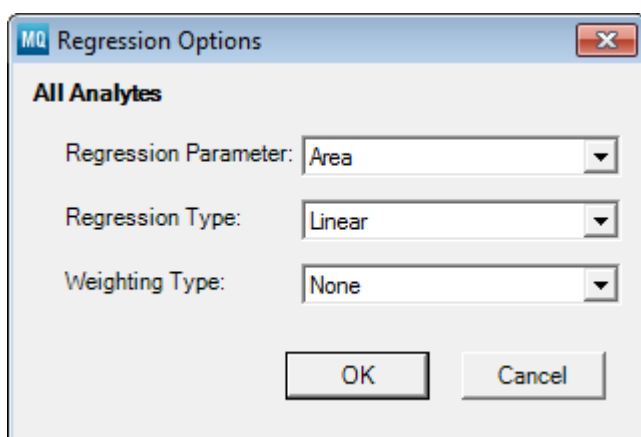


Además de inspeccionar la regresión, el usuario puede excluir las muestras **Standard** de forma que no se usen para la regresión. Después de hacer los ajustes se calcula automáticamente una nueva regresión, y parámetros como **Calculated Concentration** y **Accuracy** se recalculan para todas las muestras del analito. Consulte [Ecuaciones de regresión en la página 128](#).

Cuadro de diálogo Regression Options

Si hay muchos analitos, entonces es más sencillo aplicar los cambios usando el cuadro de diálogo **Regression Options** que cambiando los parámetros de regresión uno por uno.

Figura 10-2 Cuadro de diálogo Regression Options



Sugerencias de calibración

- Para analitos sin un patrón interno asociado, el eje y es el **Area** o **Height** del pico, según se seleccione en el método de cuantificación. Para analitos con un patrón interno, el eje y es la relación del **Area** o **Height** del pico (del analito respecto al patrón interno).
- Para analitos sin un patrón interno asociado, el eje x es la **Actual Concentration**. En caso contrario, es la relación de **Actual Concentration** (del analito respecto al patrón interno).
- Si se ha seleccionado más de un analito de la **Components & Groups List**, se superponen las calibraciones para todos los analitos. En caso contrario, se muestra la calibración para el analito seleccionado.
- La región del título muestra siempre el nombre del analito activo y de la ecuación de regresión asociada con el coeficiente de correlación. Si la regresión no se ha podido calcular, por ejemplo en caso de que no haya muestras **Standard**, entonces el título indica esto. Si las calibraciones para varios analitos están superpuestas, cambie el título entre mostrar información de todos los analitos o solo del activo haciendo doble clic en cualquier parte de la región de título. Si hay muchos analitos superpuestos, entonces podría no ser posible mostrar toda la información. En este caso, desplace el título arrastrándolo dentro del mismo.
- Los puntos de datos para las muestras **Standard** que estén en uso se representan siempre como la ecuación de calibración que usa esos puntos. El usuario puede opcionalmente mostrar los puntos de datos para las muestras **Standard** excluidas y para las muestras de **Quality Control**.
- Si el usuario hace clic en un punto de datos, se selecciona automáticamente la fila correspondiente de la **Results Table** y la vista se desplaza hasta ella, siempre que la fila esté actualmente visible en alguna parte de la tabla y no esté oculta.

Menú contextual de calibración

Haga clic con el botón derecho en el panel **Calibration** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 10-1 Opciones del menú contextual del panel de calibración

Opción de menú	Descripción
Exclude (o Include)	Si el usuario hace clic con el botón derecho directamente en un punto de datos para un patrón que no se haya excluido, entonces esta opción se usa para excluir la muestra del cálculo de regresión (para la muestra y analito del punto de datos seleccionado). Si la muestra ya se ha excluido, entonces en el texto del elemento de menú pone Include y al seleccionarlo se incluye ese punto. Después de la selección, se calcula la regresión y se actualiza la Results Table . Esta funcionalidad equivale a deseleccionar o seleccionar la casilla de verificación Used en la tabla de resultados para la fila correspondiente.
Exclude – All Analytes (o Include – All Analytes)	Excluye o incluye todos los analitos, no solo el analito correspondiente a un punto de datos seleccionado.

Tabla 10-1 Opciones del menú contextual del panel de calibración (continuación)

Opción de menú	Descripción
Show Excluded Standards	Cuando está seleccionado, los puntos de datos para los patrones excluidos (si existen) se dibujan usando círculos abiertos. Cuando se deselectan, los patrones excluidos no se muestran.
Show QCs	Cuando está seleccionado, los puntos de datos para las muestras Quality Control (QC) se dibujan usando un rombo abierto. Cuando se deselectan, las muestras QC no se muestran.
Show Legend	<p>Cuando está seleccionado, aparece una leyenda a la derecha del gráfico que muestra los símbolos para los distintos tipos de muestra (círculos cerrados para las muestras Standard, círculos abiertos para los patrones excluidos y rombos abiertos para las muestras Quality Control).</p> <hr/> <p>Nota: Si el usuario no está visualizando determinados tipos de muestra, por ejemplo, si no está seleccionada la opción Show QCs, entonces la introducción de estos tipos de muestra no está presente. Si no aparecen ni muestras de QC ni patrones excluidos, entonces esta opción no está disponible y no figura ninguna leyenda.</p> <hr/>
Use Percent Y-Axis	<p>Cuando no está seleccionado, el eje y para el gráfico está en unidades de Area o Height de pico absoluto (o la proporción de Area o Height de pico si se está usando un patrón interno). Cuando está seleccionado, el eje y se expresa como un porcentaje del punto de datos con el valor de y más grande para cada analito por separado.</p> <p>Utilizar un eje de porcentaje es útil si se superpone más de un analito y sus respuestas absolutas son apreciablemente diferentes, puesto que permite que cada trazo que se escala use toda el área vertical disponible. En caso contrario, los analitos con baja respuesta caen cerca del eje x y hay que ampliar el gráfico para verlos en detalle.</p>
Log-Log Plot	Se usa para conmutar la vista entre representar el Area contra Concentration y Log(Area) contra Log(Concentration) .

Tablas de estadísticas

11

Utilice la **Statistics Table** para ver información relacionada con la reproducibilidad del análisis. Cada fila de la tabla resume información como el promedio y la desviación estándar de un grupo de picos relacionados para el mismo analito que idealmente se esperaría que tuviese la misma respuesta.

Figura 11-1 Panel de estadísticas

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	mexocidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.59	5.429e0	5.374e0
2	mexocidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.995e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	mexocidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	mexocidol	16.00	2 of 2	1.797e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.875e1	1.768e1
5	mexocidol	32.00	1 of 2	3.366e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	mexocidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	mexocidol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.414e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.960e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.776e0	4.405e0
10	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.819e0	4.579e-1	5.86	97.74	7.496e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.553e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.885e1	1.188e0	3.98	90.30	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.489e1	3.313e0	5.11	101.33	6.251e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.423e2	1.140e2
15	nesequine	2.00	2 of 2	2.683e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	nesequine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	nesequine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	nesequine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Etiqueta	Descripción
Row	Número de fila. Haga clic en uno de los otros encabezados de columna para ordenar la tabla. Devuelva la tabla a la vista original haciendo clic sobre este encabezado.
Component Name	Nombre del analito.
Actual Concentration (o Sample Name)	Si se agrupa por concentración real, esta columna muestra la concentración. Si se agrupa por nombre de muestra, el título de la columna cambia y se muestra el nombre de la muestra.
Num. Values	Muestra m de n, en el que n es el número total de muestras a la concentración real (o con el mismo nombre de muestra) y m es el número de estas muestras utilizadas para los cálculos. Las muestras no se utilizan si el pico correspondiente no se ha podido integrar o si el campo Used se ha borrado manualmente.
Mean	Promedio de las muestras utilizadas.
Standard Deviation	Desviación estándar de las muestras utilizadas.
Percent CV	Coefficiente de variación expresado como porcentaje: $100 * (\text{desviación estándar}) / \text{media}$.

Etiqueta	Descripción
Accuracy	Valor promedio dividido entre la concentración real expresada como un porcentaje: $100 * \text{media/concentración real}$). Este campo solo aparece al agrupar por concentración real y no al hacerlo por nombre de muestra.
Values	Los valores individuales de las muestras aparecen en las columnas adicionales. Si la muestra correspondiente no se pudo integrar, entonces el valor es N/A. Si el campo Used se ha borrado manualmente, el valor se muestra con una línea de tachado.

Sugerencias para la tabla de estadísticas

- La **Statistics Table** se vincula con la **Components & Groups List** para mostrar las filas correspondientes a los analitos seleccionados. Si se seleccionan los elementos **All Components** o **All Analytes**, entonces hay entradas para todos los analitos. Si se selecciona un analito individual, entonces hay entradas solo para dicho analito. Si se selecciona un patrón interno individual de la lista, la **Statistics Table** se queda en blanco. Consulte [Lista de componentes y grupos en la página 38](#).
- Si el usuario hace clic en una de las celdas **Value**, se selecciona la fila correspondiente en la **Results Table** para el analito y la muestra siempre que la fila esté visible actualmente en la **Statistics Table**. Únicamente se muestran las muestras de tipo **Unknown** en la **Results Table**. Si la **Statistics Table** contiene información para las muestras **Standard**, las filas correspondientes no están visibles en la **Results Table**. Si el panel **Peak Review** está visible, este se vincula con la **Results Table** y se actualiza cuando se hace clic en la celda.
- Haga clic en un encabezado de columna para ordenar la **Statistics Table**.
- El usuario puede copiar la **Statistics Table** completa o solo las filas de interés.
 - Para copiar la tabla completa, haga clic en **Edit > Copy**.
 - Para copiar solo las filas de interés, selecciónelas manualmente y luego haga clic en **Edit > Copy**.
- Si se ajustan las anchuras de las columnas, estas anchuras se restauran la próxima vez que se muestre la **Statistics Table**.
- El formato y la precisión son iguales que en la **Results Table**.
- Group by Concentration for Standards and QCs** se basa en **Displayed Actual Concentration**, y no en **Actual Concentration** almacenada en la **Results Table**. Si la concentración del patrón 1 es 0,001 y la del patrón 2 es 0,005, y el formato de visualización es 0, entonces el patrón 1 y el patrón 2 se agruparán juntos, dado que ambos se tratan como 0. Para agruparlos por separado, en el cuadro de diálogo **Column Settings**, configure la precisión para **Analyte Concentration** en 0,000. Si el patrón 1 es 0,500 y el patrón 2 es 0,499, entonces, para agruparlos juntos, establezca la precisión en 0,00.

Menú contextual de la tabla de estadísticas

Haga clic con el botón derecho en la **Statistics Table** para acceder al comando **Use Peak**. Utilice este comando para configurar el campo **Used** para la muestra y el analito correspondientes a la celda seleccionada en una de las columnas **Value**. Antes de hacer clic con el botón derecho para obtener el menú, haga clic en la celda correspondiente de una de las columnas **Value** para seleccionarla.

Utilice los gráficos de métricas para representar los valores en una columna de la tabla de resultados contrastados con el número de fila u otra columna. Estos gráficos son una ayuda valiosa para la revisión visual de los datos, especialmente si los usuarios no quieren revisar todos los cromatogramas manualmente usando el panel Peak Review.

Generar un gráfico de métricas

1. Seleccione una o dos columnas en la **Results Table**.
2. Haga clic en **Show Metric Plot**.

Si se selecciona una columna, el gráfico resultante muestra los valores de la columna como una función del número de fila de la tabla. Si se seleccionan dos columnas, se representan los valores de las columnas contrastados entre sí. La primera de las dos columnas para seleccionar contiene los valores de x y la segunda los valores de y.

Guardar la configuración del gráfico de métricas

1. Abra un gráfico de métricas seleccionando una columna y luego haciendo clic en **Show Metric Plot**.
2. Haga clic con el botón derecho en el gráfico y luego haga clic en **Save Setting**.

Esto permite al usuario generar rápidamente **Metric Plots** que se utilicen con frecuencia sin tener que seleccionar cada vez la columna correspondiente.

Sugerencias para los gráficos de métricas

- Si los usuarios hacen clic con el botón izquierdo en un punto de datos, se selecciona automáticamente la fila correspondiente de la tabla de resultados y se activa su visualización. Si el panel Peak Review está abierto, también se actualiza para mostrar el cromatograma correspondiente. Esto permite realizar una revisión conveniente de los valores atípicos.
- Si se ha seleccionado más de un componente de la lista Components & Groups, se superponen los trazos de todos los componentes. De lo contrario, se muestra el trazo para el componente seleccionado.
- La región de título siempre muestra el nombre del trazo activo. Si los trazos de varios componentes están superpuestos, conmute el título entre mostrar la información de todos los trazos o solo del activo haciendo doble clic en cualquier parte de la región de título. Active un trazo en particular haciendo clic en el punto de color a la izquierda del título correspondiente.

- Guarde la configuración para el gráfico de métricas para volver a utilizarla. Haga clic con el botón derecho en el gráfico de métricas y, a continuación, haga clic en **Save Settings as**.

Menú contextual del gráfico de métricas

Haga clic con el botón derecho en el gráfico de métricas para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 12-1 Opciones del menú contextual del gráfico de métricas

Opción de menú	Descripción
Regression	Muestra una línea de regresión en el gráfico de métricas. <ul style="list-style-type: none"> • Regression Type • Weighting Type • Include standard deviation lines and Multiplier Consulte Cuadro de diálogo Regression en la página 82 .
Display "N/A" as 0.0	Cuando se selecciona esta opción, los valores no numéricos del gráfico de métricas usan un valor de y de cero. De lo contrario, dichos puntos se omiten del gráfico. Por ejemplo, se indica N/A para Retention Time de los picos que no se han podido integrar. Para esta función, se incluye un punto para dichos picos, de modo que el usuario puede ver estas muestras potencialmente problemáticas y luego vincularlas al panel Peak Review haciendo clic en el punto.
Show Legend	Cambia la leyenda que contiene los símbolos de puntos utilizados para los distintos tipos de muestra.
Label Active Series (using sample names)	Cambia si los puntos de datos se marcan utilizando el texto del campo Sample Name de la Results Table . Si hay más de un trazo superpuesto, solo se marca el trazo activo.
Use Percent Y-Axis	Cambia si el eje y utiliza unidades absolutas o un porcentaje del valor y máximo. Al utilizar una función de porcentaje, este se calcula de forma independiente para cada trazo superpuesto. Esta función se puede utilizar para representar trazos para varios componentes y la respuesta para la métrica de los componentes es significativamente distinta.
Start Y-Axis at Zero	Cambia si el eje y comienza en y=0 o en el valor de y mínimo que es necesario representar.
Connect Points With Lines	Cambia si los puntos de datos se conectan mediante líneas.
Save Setting	Si el gráfico está asociado actualmente con una configuración, esta función guarda las funciones actuales. De lo contrario, esta función se comporta igual que la función Save Setting As .

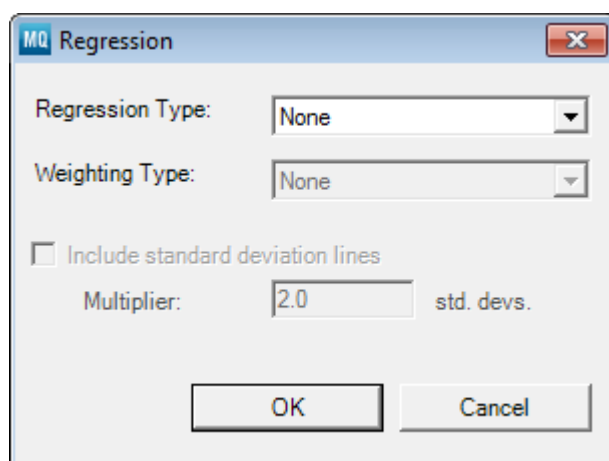
Tabla 12-1 Opciones del menú contextual del gráfico de métricas (continuación)

Opción de menú	Descripción
Save Setting As	Si se representan con frecuencia las mismas columnas, el usuario puede guardar las opciones de representación como una configuración. Esto permite que el usuario genere rápidamente un gráfico incluso si las columnas necesarias no se encuentran actualmente visibles en la Results Table . Además de las columnas, se guardan las distintas opciones de representación. Después de guardar una configuración, el nombre aparece en el menú Metric Plot .
Delete Setting	Si el gráfico actual está asociado con una configuración, utilice esta función para eliminar la configuración.

Cuadro de diálogo Regression

Haga clic para mostrar una línea de regresión en el gráfico de métricas.

Figura 12-1 Cuadro de diálogo Regression



Etiqueta	Descripción
Regression Type	Contiene los distintos tipos de regresión (lineal, cuadrática, etc.). El tipo de regresión Mean da como resultado una línea horizontal en la ubicación del valor de y promedio para todos los puntos de datos, y para el tipo de regresión Median da como resultado una línea horizontal en la ubicación del valor de la mediana de y para los puntos. Además, hay una función None que elimina cualquier regresión anterior.
Weighting Type	Los distintos tipos de ponderación se describen en Factores de ponderación en la página 129 .
Include standard deviation lines and Multiplier	Estas funciones están disponibles cuando se selecciona el tipo de regresión Mean o Median . Cuando está seleccionada, se agregan líneas discontinuas horizontales al gráfico según el número especificado de desviaciones estándar por encima y por debajo de la línea principal. Utilice esta opción para ver rápidamente los puntos que se encuentran, por ejemplo, a más de dos o tres desviaciones estándar de la media.

Utilice el **Quantitation Method Editor** para crear un método de cuantificación o editar uno existente.

Un flujo de trabajo típico es crear métodos de cuantificación usando el **New Results Table wizard**. Sin embargo, el usuario puede utilizar el **Quantitation Method Editor** para crear un método de cuantificación para usarlo como sea necesario.

Pestaña Components

Haga clic con el botón derecho en la pestaña **Components** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 13-1 Opciones del menú contextual de componentes

Opción de menú	Descripción
Find Component by Name	Se utiliza para seleccionar el componente cuyo nombre coincide con el texto. No es necesario el texto exacto para encontrar una coincidencia. Esto es útil si hay muchos componentes y el usuario desea seleccionar rápidamente uno específico. Si inicialmente no hay seleccionada una fila en la hoja de cálculo, la búsqueda comienza desde la primera fila. De lo contrario, la búsqueda comienza a partir de la fila posterior a la seleccionada y vuelve al principio. Esto resulta útil si hay más de un componente cuyo nombre contiene el texto. Si en la primera búsqueda no se encuentra el componente, busque de nuevo, dejando el primer componente seleccionado para localizar otra coincidencia en la tabla.
Insert Row Above	Inserta una única fila vacía inmediatamente encima de la fila seleccionada actualmente.
Delete Selected Rows	Elimina las filas seleccionadas actualmente de la tabla.
Sum Multiple Ions	Suma cromatogramas para varias transiciones de MRM o intervalos de masa de análisis completo. Una vez seleccionado el comando, se añaden otras columnas de masa a la tabla Components . Todas las masas seleccionadas para una fila dada se utilizan en la construcción de los XIC sumados para el analito o patrón interno correspondiente. Es recomendable dejar esta función siempre seleccionada.
Groups	Consulte Submenú de grupos en la página 85 .
Internal Standards	Consulte Submenú de patrones internos en la página 87 .

Submenú de grupos

Tabla 13-2 Opciones del menú Groups

Opción de menú	Descripción
Using Constant Group Size	Abre el cuadro de diálogo Set Automatic Groups, que se usa para rellenar automáticamente la columna Group usando el nombre del primer componente de cada grupo, suponiendo que cada grupo contenga el mismo número de componentes. Consulte Cuadro de diálogo Set Automatic Groups en la página 86 .
By Filling Down Existing Groups	Completa automáticamente el mismo nombre de grupo para un número de componentes secuenciales. Para usar este comando, especifique manualmente el nombre del grupo para el primer componente para cada grupo por separado y luego seleccione el comando. Los nombres de grupo especificados se rellenan en todos los componentes siguientes cuyo nombre de grupo está en blanco. Solo se consideran las filas cuyo nombre se ha insertado.
Using Q1 Masses	Solamente está disponible para experimentos de MRM. Se utiliza para rellenar la columna Group con masa Q1. Esta opción resulta útil si se ha especificado la misma masa Q1 para varias transiciones para el mismo compuesto y se han supervisado diferentes fragmentos. Si hay varios componentes y si algunos comparten por coincidencia la misma masa Q1, estos se asignan al mismo grupo.
Using Q3 Masses	Solamente está disponible para experimentos de MRM. Se utiliza para rellenar la columna Group con masa Q3. Esta opción es útil si se han supervisado diferentes formas isotópicas de un compuesto (con masas Q1 diferentes), pero se ha supervisado una masa Q3 constante. Si hay varios componentes y si algunos comparten por coincidencia la misma masa Q3, estos se asignan al mismo grupo.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Se utiliza para rellenar la columna Group usando las masas Q1 y Q3 (solo disponible para experimentos de MRM). Esta opción resulta útil si se han supervisado diferentes formas isotópicas de un compuesto (con masas Q1 diferentes), pero se ha supervisado un fragmento de masa Q3 consistente que contiene todos los isótopos modificados. Si hay muchos componentes y si algunos comparten por coincidencia la misma diferencia de masa, estos se asignan al mismo grupo.
Add Group to Start of Component Name	Adjunta el nombre de grupo al principio del nombre del analito o patrón interno. Puede resultar útil si los nombres iniciales no son únicos.

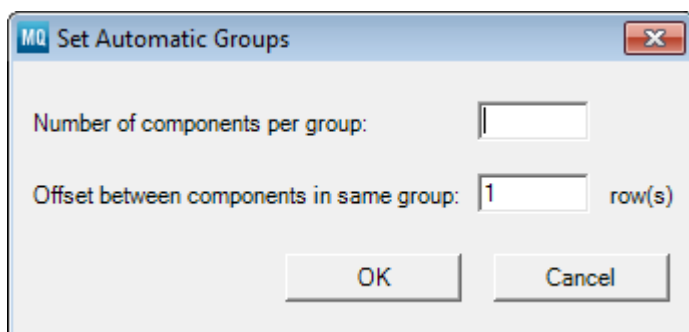
Tabla 13-2 Opciones del menú Groups (continuación)

Opción de menú	Descripción
Remove Group from Start of Component Name	Borra el nombre del grupo, si está presente, desde el principio del nombre del analito o patrón interno.
Append Summed Ions for Groups	Cuando está habilitada la opción Sum Multiple Ions, este comando anexa un nuevo componente para cada grupo que usa el cromatograma sumado del grupo. Los componentes por separado se añaden para los analitos y patrones internos para los grupos, si ambos están definidos. El nombre para los nuevos analitos se predetermina al nombre del grupo y para los patrones internos al nombre del grupo con .IS añadido. Si los componentes sumados son necesarios, y no los componentes de masa única originales, entonces se pueden borrar estos últimos.

Cuadro de diálogo Set Automatic Groups

Rellena automáticamente la columna Group con el nombre del primer componente de cada grupo, suponiendo que cada grupo contenga el mismo número de componentes.

Figura 13-1 Cuadro de diálogo Set Automatic Groups



Etiqueta	Descripción
Number of components per group	El número total de componentes para cada grupo.
Offset between components in same group	La desviación en las filas entre componentes secuenciales del mismo grupo. Este valor suele ser 1, pero puede ser más alto si los componentes para el grupo no están en filas adyacentes.

Submenú de patrones internos

Tabla 13-3 Opciones del menú Internal Standards

Opción de menú	Descripción
Set IS for All Analytes	Define el campo IS Name para todas las filas de analitos. Si se ha definido un patrón interno, se utiliza su nombre. Si no, seleccione el patrón interno requerido del cuadro de diálogo que se abre.
Set IS for Selected Analytes	Si se utiliza el mismo patrón interno para más de un analito, proporciona un acceso directo para configurar el patrón interno independientemente para cada analito, uno por uno. Consulte Set IS for Selected Analytes en la página 87 .
Set Last Component of Group as IS	Utilice este comando si los distintos componentes se han asignado a Groups, bien de forma manual o utilizando los elementos del submenú Set Groups. Se selecciona la casilla de verificación IS del último componente de cada grupo y todos los demás componentes del grupo, que se asume que son analitos, quedan establecidos para usar ese último componente como patrón interno.
Set for All Groups as for Selected Group	Se utiliza para copiar la disposición de los patrones internos del grupo correspondiente a la fila actualmente seleccionada a todos los demás grupos de forma simétrica. Esto resulta de utilidad si hay más de un patrón interno para cada uno de los grupos. Consulte Set for All Groups as for Selected Group en la página 87 .

Set IS for Selected Analytes

1. Asegúrese de que el patrón interno necesario está definido (tanto la casilla de verificación **Name** como la casilla **IS** están seleccionadas).
2. Seleccione las filas de los analitos para los que se usará el patrón interno.
3. Seleccione el elemento de menú.

Si hay más de un patrón interno definido, entonces se abre un cuadro de diálogo para pedir al usuario que seleccione el patrón interno necesario.

Set for All Groups as for Selected Group

1. Asigne grupos.
2. Indique manualmente qué componentes son patrones internos activando la casilla de verificación de la primera columna para el primer grupo.
3. Indique manualmente el patrón interno para cada analito para el primer grupo seleccionándolo de la lista desplegable en la columna **IS Name**.
4. Seleccione cualquier fila correspondiente al primer grupo.
5. Haga clic en **Set for All Groups as for Selected Group**.

Pestaña Integration

Haga clic con el botón derecho en la pestaña **Integration** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Tabla 13-4 Opciones del menú contextual de la pestaña de integración y regresión

Opción de menú	Descripción
Find Component by Name	Parecido al comando disponible en la pestaña Components , salvo que en lugar de seleccionar filas de la hoja de cálculo Components , se seleccionan elementos individuales en la lista de componentes.
Highlight Components with Uncertain RT	Se utiliza para resaltar aquellos componentes para los que el tiempo de retención esperado predeterminado (tomado como el tiempo de retención del pico con la mayor intensidad para cada cromatograma) es incorrecto. Si hay solo unos pocos componentes, revise cada uno de ellos individualmente y no utilice este comando. Sin embargo, si hay muchos componentes, utilice este comando para comprobar visualmente solo aquellos para los que haya más de un pico significativo en el cromatograma. Consulte Cuadro de diálogo Highlight Components en la página 89 .
Home Graph Axes	Devuelve el gráfico ampliado a la vista inicial, donde todos los datos son visibles.
Overlay Other Components for Group	<p>Utilice este comando para superponer cromatogramas si se han asignado varios componentes a grupos, y si se espera que todos los componentes asignados a un grupo dado tengan el mismo tiempo de retención. Por ejemplo, si representan diferentes transiciones de MRM del mismo compuesto real.</p> <p>Cuando está seleccionada esta opción, el cromatograma para el componente actual, cuya integración se está definiendo, se representa utilizando un trazo azul sólido y se muestra su área de picos integrada. Los cromatogramas, y no el área de picos integrada, se superponen para los demás componentes del mismo grupo utilizando una línea discontinua.</p>

Tabla 13-4 Opciones del menú contextual de la pestaña de integración y regresión (continuación)

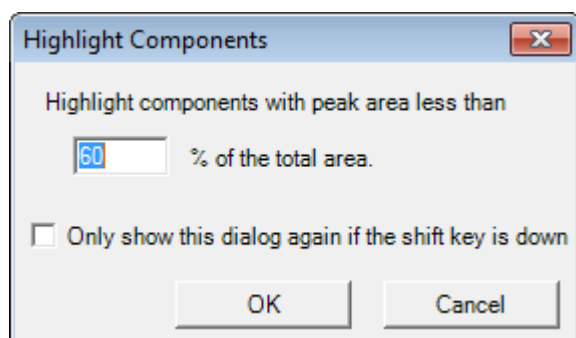
Opción de menú	Descripción
Update Retention Times	Se utiliza para restablecer los tiempos de retención para un método de cuantificación creado anteriormente. Si se abre un método de cuantificación existente y se selecciona Set New Typical Sample , los cromatogramas mostrados se corresponden con la nueva muestra, pero los tiempos de retención esperados no se ven afectados. Para cada componente, se actualiza el tiempo de retención esperado para que se corresponda con el tiempo de retención del pico con la intensidad más alta dentro de una ventana de la anchura especificada centrada en el tiempo de retención esperado original. Consulte Cuadro de diálogo Update Retention Times en la página 90 .
Set New Typical Sample	Se utiliza para asociar una muestra representativa con el método. Esta potencialidad afecta a las selecciones disponibles de la columna Q1/Q3 (para los experimentos MRM) o la columna Start - Stop (para los experimentos de perfil). También afecta a los cromatogramas que se muestran en la pestaña Integration .

Cuadro de diálogo Highlight Components

Los nombres de cualquier componente para los que el pico seleccionado automáticamente no tiene en cuenta al menos el porcentaje especificado del área de pico total en el cromatograma se indican mediante fuente en negrita. Por ejemplo, en la [Figura 13-2](#), si el pico seleccionado de forma predeterminada supone entre el 70 % y el 100 % del área total, entonces no se marcará con un indicador. Revise únicamente estos picos seleccionándolos en la lista de componentes.

En el caso de que esté seleccionada la casilla de verificación **Only show this dialog again if the shift key is down**, no se abrirá el cuadro de diálogo la siguiente vez que se seleccione el comando, a menos que el usuario pulse la tecla **Shift**. El parámetro de porcentaje del área total previamente especificado se usa automáticamente.

Figura 13-2 Cuadro de diálogo Highlight Components



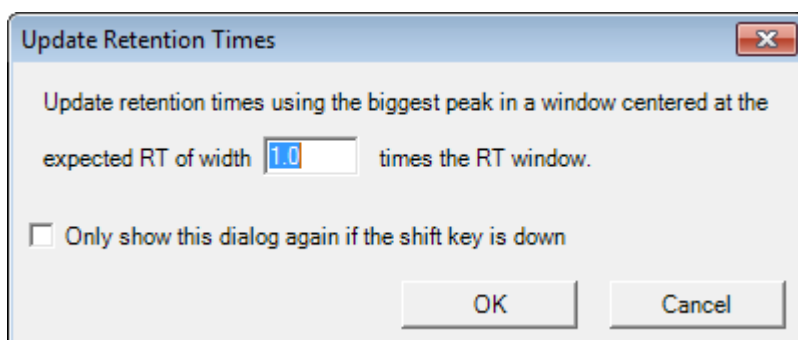
Cuadro de diálogo Update Retention Times

Se utiliza para restablecer los tiempos de retención para un método de cuantificación creado anteriormente. Si se abre un método de cuantificación ya existente y se selecciona Set New Typical Sample, los cromatogramas mostrados se corresponden con la nueva muestra, pero los tiempos de retención esperados no se ven afectados.

Para cada componente, se actualiza el tiempo de retención esperado para que se corresponda con el tiempo de retención del pico con la intensidad más alta dentro de una ventana de la anchura especificada centrada en el tiempo de retención esperado original.

En el caso de que esté seleccionada la casilla de verificación **Only show this dialog again if the shift key is down**, no se abrirá el cuadro de diálogo la siguiente vez que se seleccione el comando, a menos que el usuario pulse la tecla **Shift**. El tiempo de retención previamente especificado se utiliza automáticamente.

Figura 13-3 Cuadro de diálogo Update Retention Times



Pestaña Outlier Settings

Haga clic con el botón derecho en la pestaña **Outlier Settings** para acceder a un menú contextual. Están disponibles los siguientes comandos.

Etiqueta	Descripción
Accuracy for Standards	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Std's except LLOQ%	Modifica la tolerancia de precisión para las muestras Standard con un valor que sea consistente con los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifica la tolerancia de precisión para el Standard de concentración más baja si el procedimiento de funcionamiento estándar de su laboratorio indica una tolerancia diferente para este Standard .
Accuracy for QCs	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Quality Control .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifica la tolerancia de precisión de las muestras Quality Control con un valor que sea consistente con los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio.

Etiqueta	Descripción
Ion Ratio	Solo disponible si los componentes están asignados a grupos. Seleccione si desea utilizar la proporción de iones del área del pico o de la altura del pico. El área del pico o la altura del pico se configuran al seleccionar el parámetro de regresión durante el desarrollo del método de cuantificación.
Calculated Concentration	Al utilizar muestras Standard de una concentración conocida, este es el cálculo retrospectivo de su concentración a partir de la curva de calibración. Las ecuaciones de regresión describen cómo se realiza la regresión para los distintos tipos de regresión y ponderación.
Component	Los analitos o patrones internos para todas las muestras.
IS	El patrón interno seleccionado. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Group	Los componentes que tienen el mismo tiempo de retención (es decir, transiciones diferentes para el mismo compuesto) pueden agruparse. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Ion Ratio Tolerance (%)	Utilice la configuración predeterminada o edite este ajuste conforme a los procedimientos de funcionamiento estándar de su laboratorio. Solo está disponible si la casilla de verificación Ion Ratio está activada.
Lower Limit of Calculated Concentration	Escriba el límite inferior del rango de concentración aceptable. Cualquier muestra con una Calculated Concentration con un valor inferior a este se marca como un valor atípico de concentración.
Upper Limit of Calculated Concentration	Introduzca el límite superior del rango de concentración aceptable. Cualquier muestra con una Calculated Concentration con un valor superior a este se marca como un valor atípico de concentración.

Tabla 13-5 Opciones del menú contextual de configuración de valores atípicos

Etiqueta	Descripción
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Aplica el límite inferior de la concentración calculada a todos los analitos si todos tienen los mismos criterios.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Aplica el límite superior de la concentración calculada a todos los analitos si todos tienen los mismos criterios.

Tutorial de flujo de trabajo de análisis de cuantificación

14

Objetivos:

- Aprender a procesar datos usando el algoritmo SignalFinder™.
- Aprender a procesar datos usando el algoritmo de integración MQ4.
- Aprender a usar los parámetros del algoritmo de integración MQ4 y SignalFinder™.

Los métodos de cuantificación incluyen un conjunto de instrucciones acerca de cómo cuantificar los picos seleccionados para la integración. En este tutorial se crea un método de cuantificación al mismo tiempo que la tabla de resultados.

También se incluyen tareas adicionales que se pueden usar para manipular los datos en la **Results Table**, así como información sobre los iconos de software disponibles.

Nota: Los usuarios de la edición Audit Trail and Security están restringidos al uso de la estructura de la carpeta Analyst Data. Los usuarios solo pueden procesar archivos de datos que estén en la estructura de archivos del software Analyst® MD. Si no se mantiene la estructura de archivos y carpetas, podría suceder que el usuario no viese los cromatogramas.

Acerca de las curvas de calibración

Una curva de calibración (también conocida como curva de concentración estándar) es un método que permite determinar la concentración de una sustancia en una muestra **Unknown** comparando la muestra **Unknown** con un conjunto de muestras **Standard** de concentración conocida. La curva de calibración es un gráfico de cómo responde el instrumento (la señal analítica) ante los cambios de concentración del analito (la sustancia que se va a medir). El usuario prepara una serie de muestras **Standard** en un rango de concentraciones próximas a la concentración esperada del analito en la muestra **Unknown**.

Requisitos previos

En el software AnalystAnalyst® MD, seleccione el proyecto **Example**.

El archivo Mix_batch_1. wiff se encuentra en la carpeta Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

Modificar las columnas mostradas en la tabla de resultados

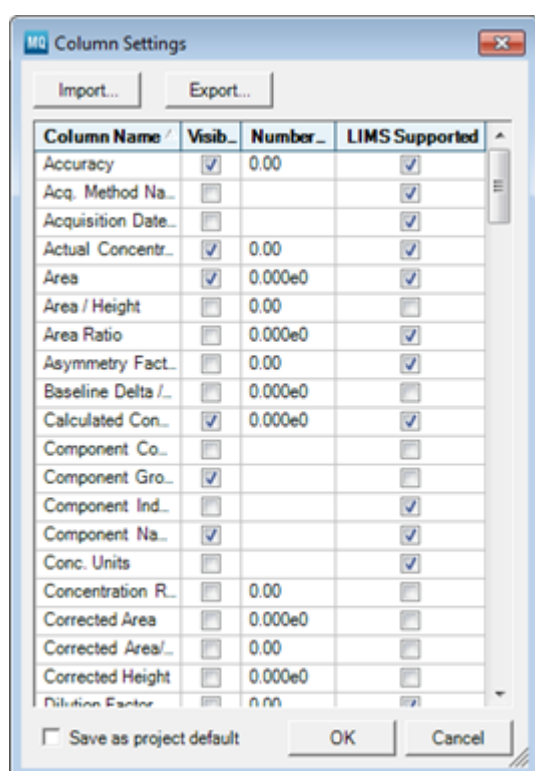
Utilice este procedimiento si desea mostrar u ocultar columnas de la **Results Table** o cambiar la precisión del formato de número. Para los campos numéricos, utilice el formato 0.00 para notaciones no científicas y

el formato 0.00e0 para notaciones científicas. Cambie los puntos decimales para indicar la precisión de los números que se muestran. Solo se pueden utilizar un punto (.) como separador de decimales. No se admite la agrupación de dígitos.

Nota: Algunas columnas críticas de la información de la muestra, como **Sample Name**, **Sample ID**, entre otras, no deben ocultarse cuando los usuarios personalizan la configuración de las columnas de la **Results Table**.

1. Haga clic con el botón derecho en la **Results Table** y luego haga clic en **Column Settings**.

Figura 14-1 Cuadro de diálogo Column Settings



2. Active o desactive la casilla de verificación en la columna **Visible** según sea necesario.
3. En la columna **Number Format**, cambie el formato a entero o notación científica. El número de posiciones decimales que se muestran se puede cambiar también.

¡Sugerencia! Para aplicar la configuración de columna a todas las **Results Tables** del proyecto, seleccione la casilla de verificación **Save as project default**.

4. Haga clic en **OK**.

Procesar datos usando el algoritmo de integración SignalFinder™

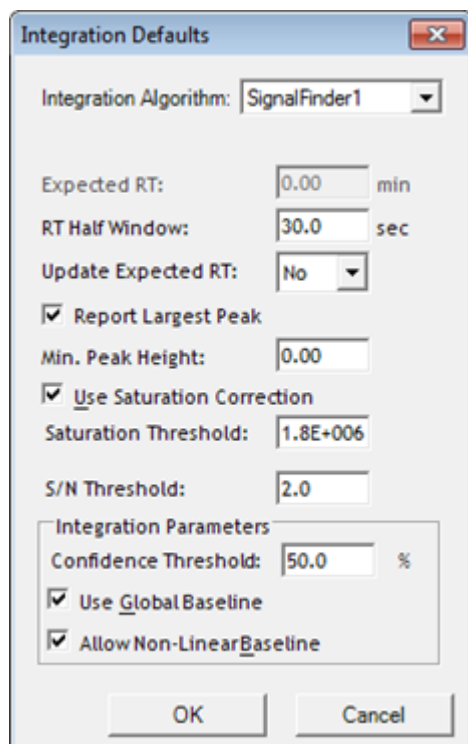
Al contrario que el algoritmo de integración MQ4 o que los algoritmos en el software Analyst® MD, el SignalFinder™ construye un modelo de pico utilizando la muestra seleccionada al crear un método de cuantificación. Este modelo describe la forma del pico seleccionado que utiliza el algoritmo. En el momento de la integración, el algoritmo de integración SignalFinder aplica este modelo a las otras muestras, ampliando o sesgando la muestra. Esto permite, para el caso en que la forma del pico es similar, pero no idéntica, un análisis o patrón interno dados para múltiples muestras.

Configurar los parámetros de integración de picos

Utilice los procedimientos siguientes para comprobar o configurar el algoritmo de integración para procesar los datos. Consulte [Acerca del algoritmo de integración SignalFinder en la página 110](#).

1. En el software Analyst® MD, en la barra **Navigation**, bajo **Companion Software**, haga doble clic en **MultiQuant 3.0.3**.
2. Haga clic en **Edit > Project Integration Defaults**.
3. En el cuadro de diálogo **Integration Defaults**, seleccione **SignalFinder1** de la lista **Integration Algorithm**.
4. Seleccione la casilla de verificación **Use Saturation Correction** y luego configure el **Saturation Threshold** a **1.8E+006**.

Figura 14-2 Cuadro de diálogo Integration Defaults



Nota: Los picos por encima del **Saturation Threshold** se consideran saturados. Este valor depende del detector.

5. Haga clic en **OK**.

Crear una tabla de resultados

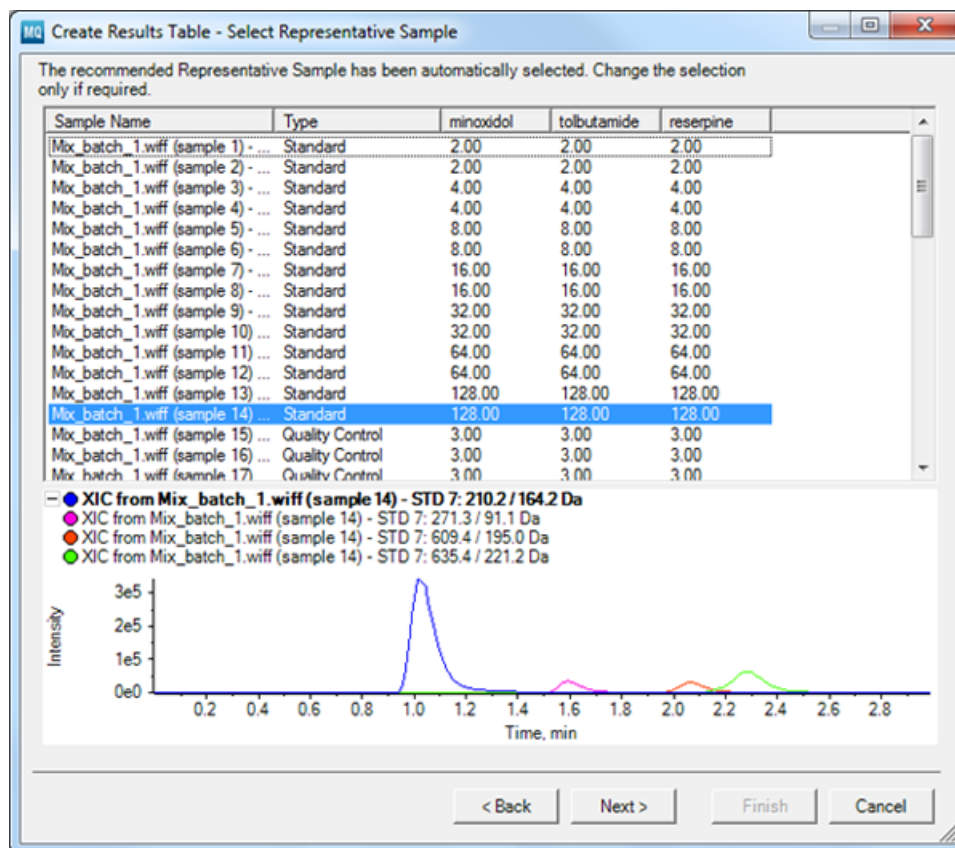
1. Haga clic en **File > New Results Table**.
2. En la página **Create Results Table - Select Samples**, expanda la carpeta **Example Data** y luego arrastre el archivo **Mix_batch_1.wiff** al panel **Selected**.
3. Haga clic en **Next**.
4. Haga clic en la opción **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Haga clic en **New**.
6. Escriba un nombre para el método en el cuadro de diálogo **Save Quantitation Method As** y luego haga clic en **Save**.
7. Haga clic en **Next**.

En la página **Create Results Table - Select Representative Sample**, se ha seleccionado una muestra representativa. El software recomienda una muestra representativa basada en seleccionar un

cromatograma que proporcione la mejor oportunidad para seleccionar parámetros de integración que se adapten al lote completo. Se recomienda seleccionar un patrón no saturado de alta concentración o una muestra de **QC** (TIC inferior a 1E+006 cps).

¡Sugerencia! Durante la revisión de picos, se puede seleccionar otra muestra a partir de la cual construir un modelo de pico durante la revisión de picos.

Figura 14-3 Página Create Results Table - Select Representative Sample



8. En la página **Create Results Table - Define Components**, confirme los patrones internos y analitos.
9. Haga clic en **Next**.

Figura 14-4 Página Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

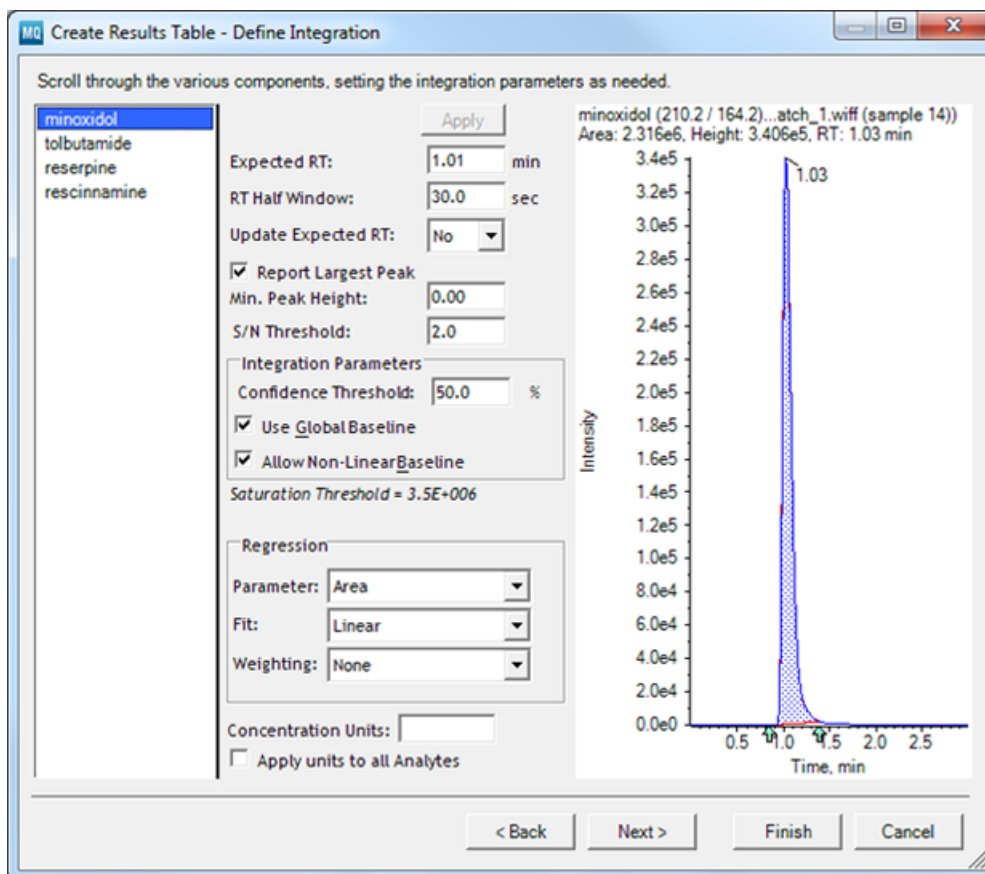
< Back Next > Finish Cancel

Nota: Cuando se crea un método de adquisición, si el nombre del componente va incluido en la columna **ID** de la tabla de rangos de masas, entonces ese nombre se rellena automáticamente en la página **Define Components**. Si no se ha incluido el nombre del componente, entontes actualice manualmente la tabla con el nombre del componente.

En la página **Create Results Table - Define Integration**, se muestran los analitos y los patrones internos a la izquierda. Los parámetros de integración actuales se han aplicado a la muestra representativa y se muestra el cromatograma.

En el panel **Integration**, aparecen los componentes de la muestra representativa seleccionada anteriormente. Se detectan los picos en la muestra representativa y se integran con los parámetros que se configuraron en el cuadro de diálogo **Integration Defaults**.

Figura 14-5 Página Create Results Table - Define Integration



Si es necesario, ajuste los parámetros de búsqueda de picos y las posiciones de las flechas verdes en el eje x de los cromatogramas. Esto posibilita al usuario una configuración más precisa de la posición de inicio y fin de la integración de picos. Efectivamente, esta es una forma visual de ajustar dos parámetros de búsqueda de picos que se guardan con el método de cuantificación y se aplican a todos los picos que se van a integrar. El software delimita los límites de estos parámetros dentro de lo que considera unos límites razonables para la extensión del pico.

Si hay más de un pico en el cromatograma y el pico correcto no se ha seleccionado automáticamente, entonces arrastre un pico para configurar el tiempo de retención esperado. Arrastre desde el inicio real hasta el final real del pico y no seleccione una región ni demasiado amplia ni demasiado estrecha. El motivo es que el algoritmo asume que solo hay un pico en la selección. Por ejemplo, si el conjunto de datos tiene mucho ruido y el algoritmo encuentra dos picos combinados donde solo hay un pico presente, entonces seleccione una región que contenga los dos picos para que así el algoritmo tenga que ajustar sus parámetros internos para encontrar un pico solamente. Y al revés, si el algoritmo encontró un pico cuando se pensaba que había dos o más picos adyacentes presentes, seleccione una región que abarque solamente el pico de interés.

10. En el grupo **Integration Parameters**, seleccione la casilla de verificación **Global Baseline** para usar todo el cromatograma como línea de referencia.

Si esta opción no se selecciona, entonces el software tiene en cuenta solamente una zona estrecha en torno al pico de interés.

11. Seleccione la casilla de verificación **Allow Non-Linear Baseline** entre una línea de referencia lineal o no lineal. Una línea de referencia no lineal estima la línea de referencia debajo de cada pico. Una línea de referencia lineal encaja una línea entre los puntos del principio y del final de ese grupo específico de picos.
12. Revise la integración de los picos para cada componente haciendo clic en el nombre del componente en el panel izquierdo. Ajuste los parámetros de integración para hacer que el pico representativo se integre correctamente.
13. Para los componentes **Minoxidol, Tolbutamida y Reserpina**, utilice los parámetros del grupo **Regression** para configurar lo siguiente y luego haga clic en **Apply**:
 - **Parameter:** Area
 - **Fit:** Linear
 - **Weighting:** None
14. Configure las **Concentration Units** a **ng/mL** y luego seleccione la casilla de verificación **Apply units to all Analytes**.
15. Haga clic en **Apply**.
16. Haga clic en **Finish**.

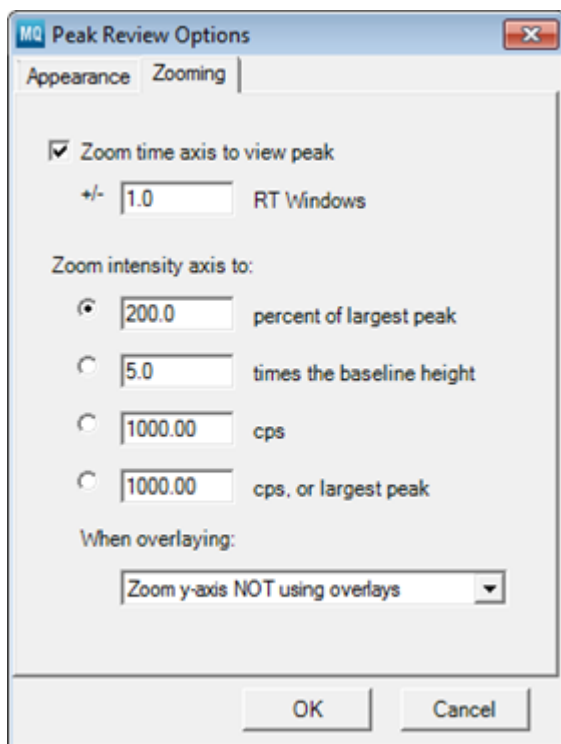
Los archivos de las muestras se integran automáticamente y se genera una **Results Table**.

Consulte [Revisar picos en la página 99](#) para administrar los datos de la **Results Table**. Consulte [Reports en la página 134](#) para obtener información sobre cómo crear informes.

Revisar picos

1. Haga clic en el icono **Peak Review**.
2. Haga clic con el botón derecho en la tabla y luego haga clic en **Column Settings**.
3. Haga visible la columna **SF Saturated**.
4. Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** y luego haga clic en **Options**.
5. En la pestaña **Zooming**, cambie el eje de tiempo de **Zoom time axis to view peak** a **1**.
6. Configure **Zoom intensity axis** a **200 percent of largest peak**.

Figura 14-6 Opciones de revisión de picos



7. Utilice las flechas rojas para desplazarse por los picos.

Si el detector se satura, entonces el pico parece más plano de lo normal. Por ejemplo, este pico tendría un perfil rojo alrededor del pico y aparecería **Yes** en la columna **SF Saturated** porque la intensidad del pico está por encima del umbral de saturación de $1,8^6$ cps.

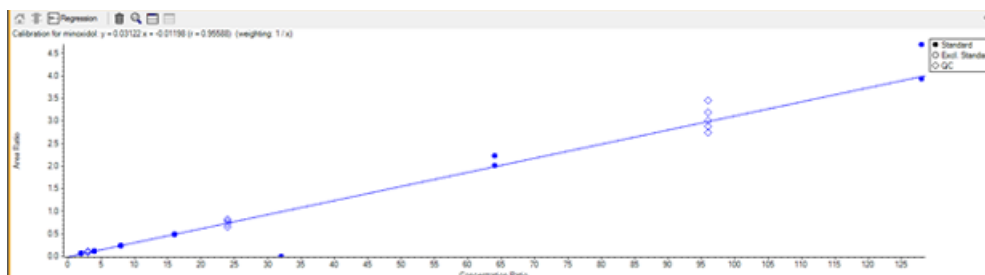
Nota: La muestra representativa podría no ser adecuada para todos los componentes. Se puede seleccionar una nueva muestra representativa durante la revisión de picos y generar un modelo nuevo.

8. Para crear un modelo nuevo, seleccione un nuevo pico y luego haga clic en el icono **Update Peak Model**. Seleccione un pico de forma similar a los otros picos y que no esté saturado.
9. Haga clic con el botón derecho y luego haga clic en **Update Quantitation Method for Component**.

Modificar la curva de calibración

1. Haga clic en el icono **Show Calibration Curve** para visualizar la curva de calibración.
2. Para añadir una leyenda, haga clic con el botón derecho en el panel **Calibration** y luego haga clic en **Show Legend**.

Figura 14-7 Curva de calibración



- Para añadir los controles de calidad a la curva, haga clic con el botón derecho en el panel **Calibration** de nuevo y luego haga clic en **Show QCs**.

¡Sugerencia! Para excluir un punto de la curva, haga clic con el botón secundario en un punto de la curva y, a continuación, haga clic en **Exclude**.

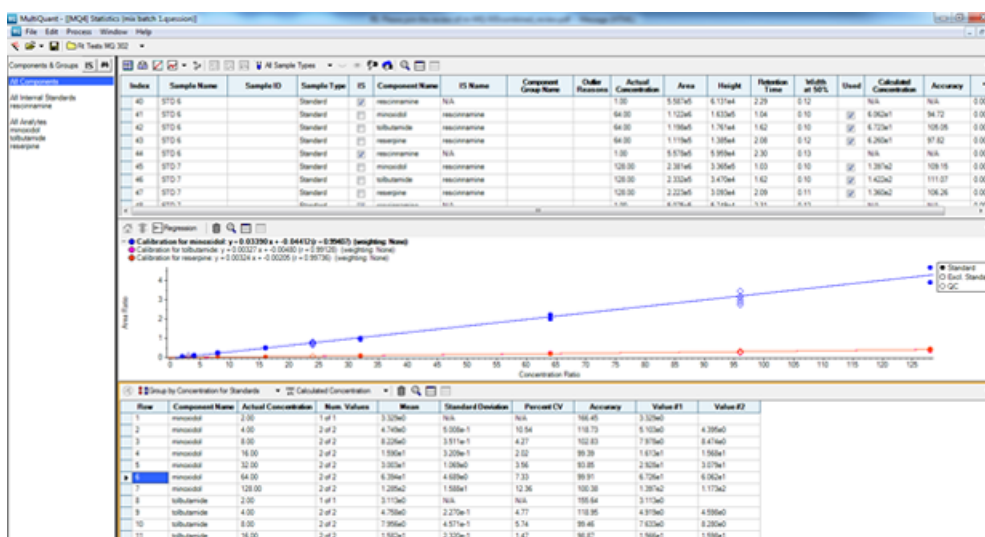
- Para confirmar o editar los parámetros de regresión para un analito individual, seleccione el analito en la lista **Components and Group** y luego haga clic en el botón **Regression** de la barra de herramientas.

Revisar las estadísticas de muestras

Los usuarios pueden revisar estadísticas para una sola tabla de resultados. La revisión de la integración de picos, la curva de calibración y las estadísticas de muestras es un proceso iterativo.

- Con una tabla de resultados abierta, haga clic en el icono **Show Statistics Table**.
- En la lista **Sample Grouping**, haga clic en un elemento para especificar cómo debe agruparse la muestra (para un analito determinado) para el cálculo de las estadísticas.

Figura 14-8 Panel de estadísticas



3. En la lista **Metric**, haga clic en un elemento para especificar la métrica real que se utilizará para el cálculo de las estadísticas.
4. Revise las columnas **Value**. Los puntos tachados indican los puntos de datos excluidos.

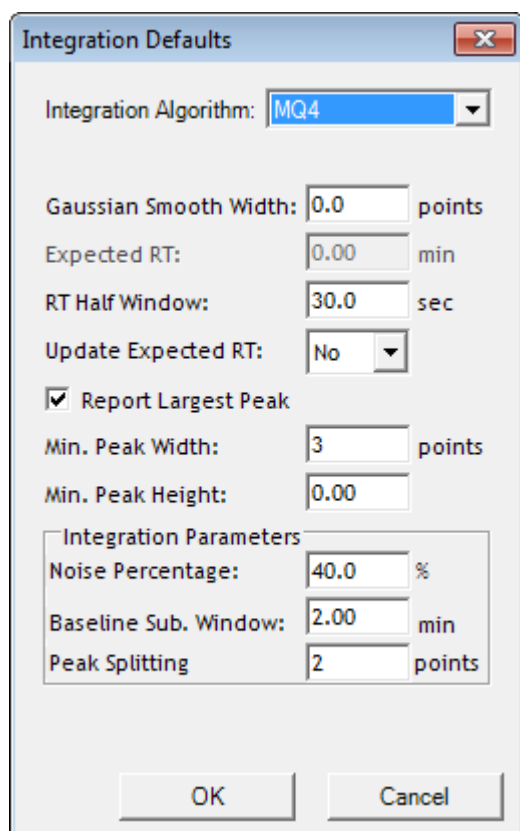
Procesar datos usando el algoritmo de integración MQ4

Configurar los parámetros de integración de picos

Utilice el procedimiento siguiente para comprobar o configurar el algoritmo de integración antes de procesar los datos. Consulte [Parámetros del algoritmo de integración MQ4 en la página 117](#).

1. En el software Analyst[®] MD, en la barra **Navigation**, bajo **Companion Software**, haga doble clic en **MultiQuant 3.0.3**.
2. Haga clic en **Edit > Project Integration Defaults**.
3. En el cuadro de diálogo **Integration Defaults**, en la lista **Integration Algorithm** seleccione **MQ4**.

Figura 14-9 Cuadro de diálogo Integration Defaults



4. Si es necesario, cambie los parámetros para el proyecto y luego haga clic en **OK**.

El algoritmo de integración MQ4 y la configuración del parámetro se usan para todos los métodos nuevos creados en esta carpeta del proyecto **Example**. Esta configuración predeterminada está basada en el proyecto. Para cambiar la configuración predeterminada para otros proyectos, repita este procedimiento para el proyecto seleccionado.

Crear una tabla de resultados

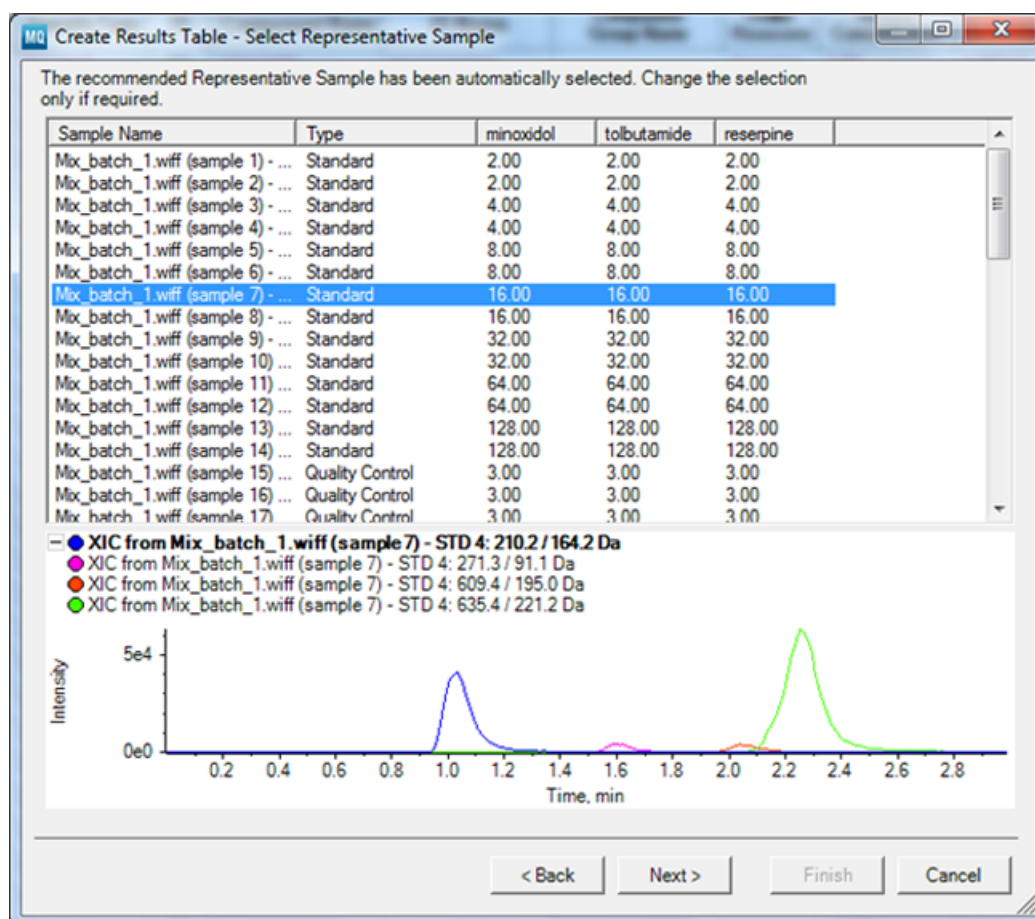
1. Haga clic en **File > New Results Table**.
2. En la página **Create Results Table - Select Samples**, expanda la carpeta **Example Data** y luego arrastre el archivo **Mix_batch_1.wiff** al panel **Selected**.
3. Haga clic en **Next**.
4. Haga clic en la opción **Create New Method (MQ4)**.
5. Haga clic en **New**.
6. Escriba un nombre para el método en el cuadro de diálogo **Save Quantitation Method As** y luego haga clic en **Save**.

En este tutorial se crea un método. La creación de métodos proporciona una oportunidad para revisar y aplicar diferentes parámetros para la integración de los datos.

Si hay un método existente, seleccione la opción **Choose Existing Method** y, a continuación, active la casilla de verificación **Edit Method** para revisar y aplicar diferentes parámetros al método. Si la casilla de verificación **Edit Method** no está activada, entonces el asistente no creará la **Results Table** con el método existente.

7. En la página **Create Results Table - Select Representative Sample**, se recomienda y selecciona una muestra representativa.

Figura 14-10 Página Create Results Table - Select Representative Sample



- Haga clic en **Next**.

El software recomienda una muestra representativa basada en seleccionar un cromatograma que proporcione la mejor oportunidad para seleccionar parámetros de integración que se adapten al lote completo. Se recomienda que el segundo más bajo entre los patrones de concentración o muestra de control de calidad para el algoritmo de integración MQ4 se seleccione si la información de concentración del analito está incluida en el archivo .wiff. Por ejemplo, si el rango de concentración es de uno a ocho, entonces el segundo más bajo es dos. Si la muestra representativa predeterminada no es lo suficientemente intensa, seleccione entonces otra muestra representativa haciendo clic en el botón **Back** del asistente y seleccionando otra muestra. Se puede seleccionar otra muestra durante la revisión de picos. Consulte [Revisar picos en la página 107](#).

- En la página **Create Results Table - Define Components**, confirme los patrones internos y analitos.

Figura 14-11 Página Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: **MRM (4 transitions)**

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back Next > Finish Cancel

10. Haga clic en **Next**.

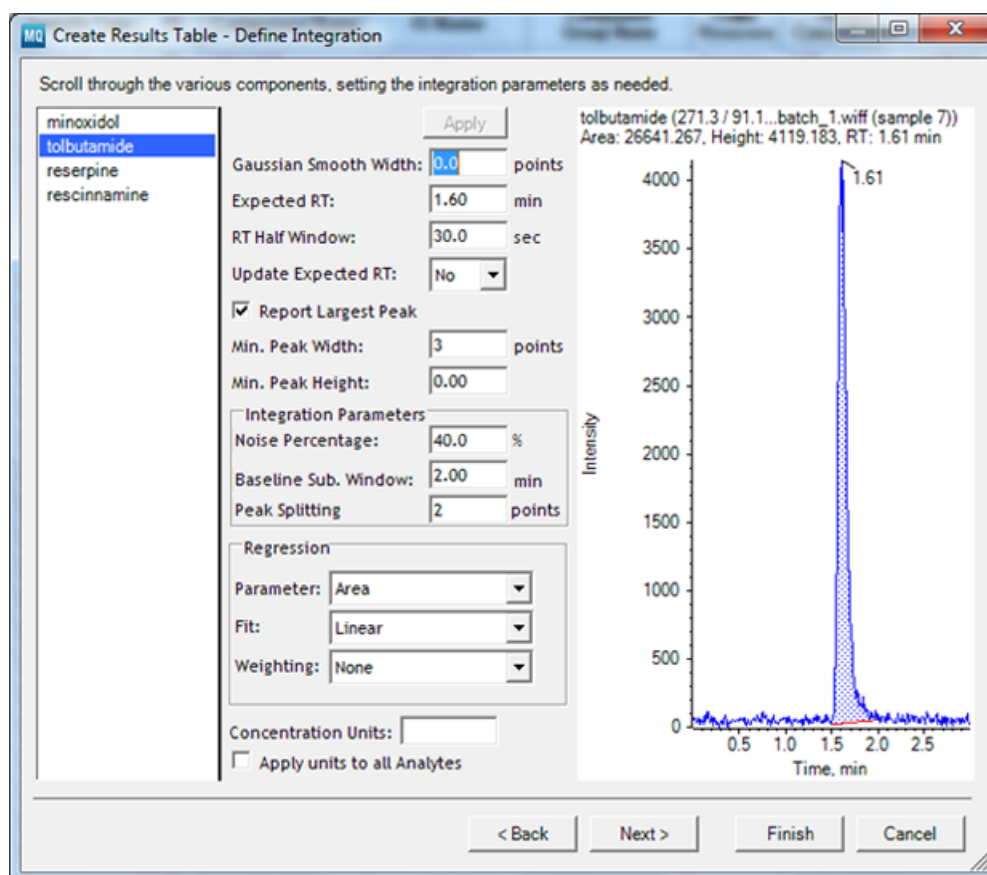
Nota: Cuando se crea un método de adquisición, si el nombre del componente va incluido en la columna **ID** de la tabla de rangos de masas, entonces ese nombre se rellena automáticamente en la página **Define Components**. Si no se ha incluido el nombre del componente, entonces actualice manualmente la tabla con el nombre del componente. Si se añade una extensión .IS a un nombre de componente, el software identifica el componente como un patrón interno y asigna el componente .IS como el patrón interno para su analito correspondiente.

En la página **Create Results Table - Define Integration**, se muestran los analitos y los patrones internos a la izquierda. Los parámetros de integración actuales se han aplicado a la muestra representativa y se muestra el cromatograma.

En el panel **Integration**, aparecen los componentes de la muestra representativa seleccionada anteriormente. Se detectan los picos en la muestra representativa y se integran con los parámetros que se configuraron en el cuadro de diálogo **Integration Defaults**.

11. Revise la integración de los picos para cada componente haciendo clic en el nombre del componente en el panel izquierdo. Ajuste los parámetros de integración para hacer que el pico representativo se integre correctamente. Consulte [Configurar los parámetros de integración de picos en la página 102](#).

Figura 14-12 Página Create Results Table - Define Integration



12. Para los componentes **Minoxidol**, **Tolbutamida** y **Reserpina**, utilice los parámetros del grupo **Regression** para configurar lo siguiente y luego haga clic en **Apply**:

- **Parameter:** Area
- **Fit:** Linear
- **Weighting:** None

13. Configure las **Concentration Units** a **ng/mL** y luego seleccione la casilla de verificación **Apply units to all Analytes**.

14. Haga clic en **Apply**.

15. Haga clic en **Finish**.

Los archivos de las muestras se integran automáticamente y se genera una tabla de resultados.

Figura 14-13 Tabla de resultados

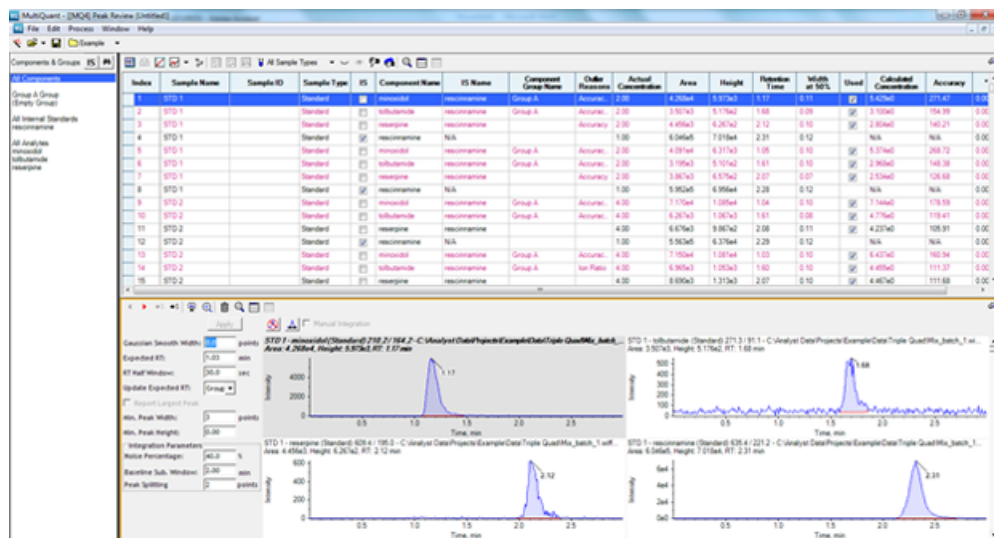
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Other Reasons	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.17e4	1.17	0.11	IS	5.17e4	101.16
2	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.50e4	5.17e4	1.68	0.09	IS	3.10e4	154.99
3	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e4	2.12	0.10	IS	2.89e4	140.21
4	STD-1		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.04e4	7.21e4	2.31	0.12	IS	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.09e4	6.31e4	1.05	0.10	IS	5.37e4	269.72
6	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.10e4	5.10e4	1.61	0.10	IS	2.98e4	148.26
7	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.80e4	6.57e4	2.07	0.07	IS	2.53e4	126.68
8	STD-1		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	5.90e4	6.99e4	2.28	0.12	IS	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.04	0.10	IS	4.94e4	123.64
10	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.26e4	1.06e4	1.61	0.08	IS	4.19e4	111.37
11	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.67e4	9.96e4	2.08	0.11	IS	4.23e4	108.91
12	STD-2		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	5.90e4	6.57e4	2.29	0.12	IS	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	7.10e4	1.08e4	1.03	0.10	IS	4.29e4	108.90
14	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	6.90e4	1.06e4	1.62	0.10	IS	4.49e4	111.37
15	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	6.04e4	7.21e4	2.28	0.10	IS	4.42e4	111.68
16	STD-2		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.04e4	7.21e4	2.28	0.10	IS	N/A	N/A
17	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.02e4	2.28e4	1.03	0.10	IS	7.62e4	97.62
18	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.30e4	2.04e4	1.60	0.09	IS	7.49e4	93.70
19	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.40e4	1.87e4	2.07	0.11	IS	7.97e4	97.67
20	STD-3		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.74e4	7.32e4	2.28	0.10	IS	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.42e4	2.28e4	1.03	0.10	IS	8.32e4	104.34
22	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.28e4	1.89e4	1.60	0.10	IS	8.14e4	101.79
23	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.30e4	1.89e4	2.07	0.11	IS	7.97e4	98.62
24	STD-3		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.74e4	7.32e4	2.28	0.10	IS	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.89e4	4.39e4	1.03	0.10	IS	1.89e4	99.95
26	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.89e4	4.11e4	1.61	0.10	IS	1.95e4	97.07
27	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.78e4	3.84e4	2.08	0.11	IS	1.92e4	98.28
28	STD-4		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.74e4	7.32e4	2.29	0.10	IS	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.89e4	4.18e4	1.04	0.10	IS	1.95e4	97.11
30	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.89e4	4.29e4	1.63	0.10	IS	1.95e4	99.13
31	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.89e4	4.12e4	2.09	0.10	IS	1.94e4	96.78
32	STD-4		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.74e4	7.32e4	2.30	0.10	IS	N/A	N/A

Consulte [Revisar picos en la página 99](#) para administrar los datos de la tabla de resultados. Consulte [Reports en la página 134](#) para obtener información sobre cómo crear informes.

Revisar picos

1. Haga clic en el icono **Peak Review**.

Figura 14-14 Panel de revisión de picos



2. Haga clic con el botón derecho en la tabla y luego haga clic en **Column Settings**.
3. Haga clic con el botón derecho en el panel **Peak Review** y luego haga clic en **Options**.

4. En la pestaña **Zooming**, cambie **Zoom time axis to view peak** a **3 RT Windows**.
5. Si un cromatograma contiene varios picos y se ha integrado uno incorrecto, arrastre por encima del pico correcto para configurar un nuevo **Expected RT**. Si es necesario, ajuste los parámetros de búsqueda e integración de los picos. Consulte [Algoritmos de integración en la página 110](#).
6. Para aplicar los parámetros nuevos a todas las demás muestras, para el mismo componente, haga clic con el botón derecho del ratón sobre el cromatograma y, a continuación, haga clic en **Update Quantitation Method for Component**.
7. El método de cuantificación integrado se puede modificar al visualizar la **Results Table** haciendo clic en **Edit > Modify Results Table Method**. El usuario puede cambiar las opciones de regresión de los parámetros de integración y la información de componentes para cada componente.

Si se cambian las opciones de regresión de los parámetros de integración y la información de componentes para cada componente, solo se modifica el método de cuantificación integrado en la **Results Table**. El archivo del método de cuantificación real utilizado para crear la **Results Table** no se ve afectado. Para utilizar este método de cuantificación integrado para procesar otros archivos de datos, exporte este método integrado a un archivo de método con la función **Export**.

Nota: Elimine la integración haciendo clic en **Set Peak to Not Found** para ver los datos sin procesar antes de integrar manualmente el pico.

8. Haga clic en el icono **Enable Manual Integration Mode** en el panel **Peak Review** para utilizar el modo de integración manual. Arrastre el cursor desde la base de un lado del pico de interés al otro lado. De este modo, el pico se integrará manualmente y los parámetros de integración utilizados anteriormente ya no estarán disponibles.

¡Sugerencia! Si el pico acaba de modificarse, revierta entonces el pico al método original haciendo clic con el botón derecho y luego haga clic en **Revert Peak to Original Method**.

Nota: El campo **Calculated Concentration** en la **Results Table** refleja los cambios derivados del ajuste de la curva a los puntos del patrón.

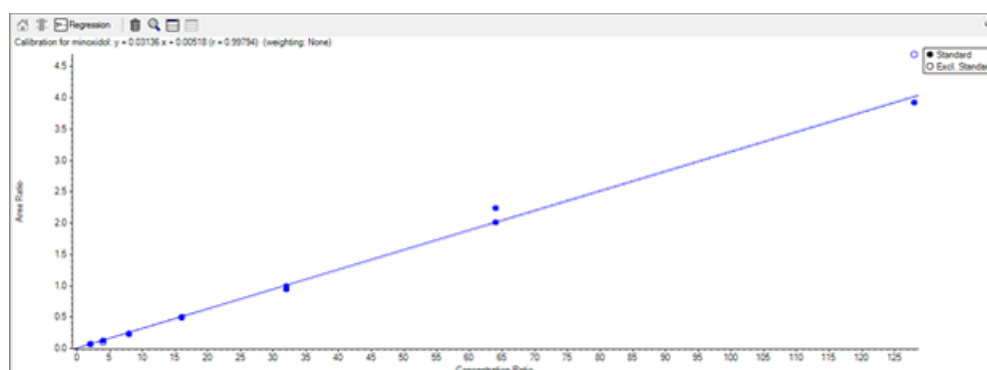
Modificar la curva de calibración

1. Haga clic en el icono **Show Calibration Curve** para visualizar la curva de calibración.
2. Para añadir una leyenda, haga clic con el botón derecho en el panel **Calibration** y luego haga clic en **Show Legend**.
3. Para añadir los controles de calidad a la curva, haga clic con el botón derecho en el panel **Calibration** de nuevo y luego haga clic en **Show QCs**.

¡Sugerencia! Para excluir un punto de la curva, haga clic con el botón secundario en un punto de la curva y, a continuación, haga clic en **Exclude**.

- Para confirmar o editar los parámetros de regresión para un analito individual, seleccione el analito en el panel **Components and Group** y luego haga clic en el botón **Regression** de la barra de herramientas.
- Para hacer que la curva de calibración se ajuste mejor, excluya la segunda muestra STD 2 (concentración de 4,00 ng/ml) y la primera muestra STD 7 (concentración de 128,00 ng/ml). Para ello, utilice la columna **Actual Concentration** y la columna **Used** para eliminar las muestras. Deseleccione la casilla de verificación de la columna Used para eliminar el punto de la curva. La curva de calibración debe tener ahora el aspecto que muestra la [Figura 14-15](#).

Figura 14-15 Curva de calibración con muestras excluidas



Revisar las estadísticas de muestras

Los usuarios pueden revisar estadísticas para una sola tabla de resultados. La revisión de la integración de picos, la curva de calibración y las estadísticas de muestras es un proceso iterativo.

- Con una tabla de resultados abierta, haga clic en el icono **Show Statistics Table**.

Figura 14-16 Tabla de estadísticas

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Group	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Initial at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	2.00	3.9760	5.1760	1.61	0.10		2.4250	121.33
6	STD 1		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	2.00	3.9760	5.1760	1.61	0.10		2.4250	121.33
12	STD 2		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	4.00	6.2670	1.8670	1.61	0.10		4.1250	103.43
14	STD 2		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	4.00	6.2670	1.8670	1.61	0.10		4.1250	98.23
18	STD 3		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	8.00	1.3574	2.5470	1.61	0.10		6.9150	86.40
22	STD 3		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	8.00	1.3574	1.8360	1.61	0.10		7.5750	94.85
26	STD 4		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	16.00	2.6844	4.1760	1.61	0.10		1.5114	94.44
30	STD 4		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	16.00	2.6844	4.2560	1.63	0.10		1.5451	96.54
34	STD 5		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	32.00	5.6794	6.4270	1.61	0.10		2.8871	90.23
38	STD 5		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	32.00	5.6794	6.4270	1.62	0.10		3.0561	99.59
42	STD 6		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	64.00	1.1156	1.7624	1.61	0.10		6.3041	99.50
46	STD 6		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	64.00	1.1156	1.7624	1.62	0.10		6.7621	105.97
50	STD 7		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	128.00	2.3305	3.4754	1.62	0.10		1.4442	112.83
54	STD 7		Standard		Isobutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	128.00	2.3305	3.4754	1.60	0.10		1.1962	90.28
58	QC 1		Quality Control		Isobutamide	recombinant	Group A	Accuracy	1.30	6.7560	8.3562	1.60	0.10		3.7950	125.16

Row	Component Name	Actual Concentration	Sum Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	Isobutamide	2.00	2 of 2	2.3305	3.54e-2	4.04	117.36	2.4250	2.2500
2	Isobutamide	4.00	2 of 2	3.9760	2.30e-1	5.84	99.33	4.1250	3.8050
3	Isobutamide	8.00	2 of 2	7.2420	4.67e-1	6.45	90.52	6.9150	7.5750
4	Isobutamide	16.00	2 of 2	1.5201	2.37e-1	1.55	95.49	1.5114	1.5451
5	Isobutamide	32.00	2 of 2	2.3305	1.21e0	4.08	92.91	2.8871	3.0561
6	Isobutamide	64.00	2 of 2	6.3421	3.38e0	5.17	102.23	6.3041	6.7621
7	Isobutamide	128.00	2 of 2	1.3302	2.04e1	15.70	101.55	1.4442	1.1962

2. En la lista **Sample Grouping**, haga clic en un elemento para especificar cómo debe agruparse la muestra (para un analito determinado) para el cálculo de las estadísticas
3. Haga clic en la columna **Value #1**.

Nota: El campo **Group by Concentration for Standards and QCs** se basa realmente en **Displayed Actual Concentration**, y no en la **Actual Concentration** almacenada en la tabla de resultados. Si la concentración del patrón 1 es 0,001 y la del patrón 2 es 0,005, y el formato de visualización es 0, entonces el patrón 1 y el patrón 2 se agruparán juntos, dado que ambos se tratan como 0. Para agruparlos por separado, en el cuadro de diálogo **Column Settings**, configure la precisión para **Analyte Concentration** en 0,000. Si el patrón 1 es 0,500 y el patrón 2 es 0,499, entonces, para agruparlos juntos, establezca la precisión en 0,00. Consulte [Modificar las columnas mostradas en la tabla de resultados en la página 92](#).

4. Haga clic en un elemento de la lista **Metric** para especificar la métrica real que se utilizará para el cálculo de las estadísticas.
5. Revise las columnas **Value**. Los puntos tachados indican los puntos de datos excluidos.

Algoritmos de integración

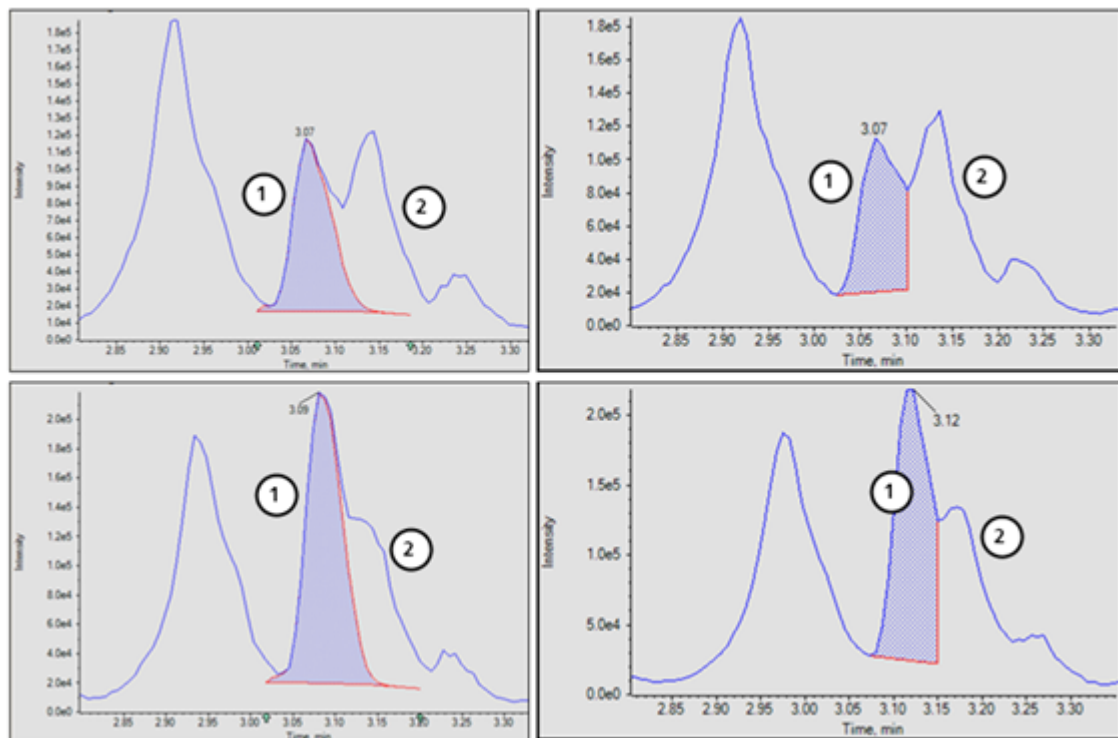
Esta sección describe los distintos parámetros disponibles para cada algoritmo.

Acerca del algoritmo de integración SignalFinder

Picos de elución próxima

El algoritmo de integración SignalFinder™ da una representación más exacta del área del pico de los picos de elución próxima. La [Figura 14-17](#) ilustra un ejemplo de cómo los algoritmos de integración MQ4 (gráfico de la derecha) y SignalFinder (gráfico de la izquierda) manejan picos de elución próxima. En este ejemplo el pico de fondo (elemento 2) está interfiriendo con el pico de interés (elemento 1). Como el pico de interferencia viene desde el LC o la matriz, es suficientemente constante a través de todo el lote. Sin embargo, la intensidad del pico del analito aumenta según aumenta la concentración del analito, lo cual produce un cambio drástico de las formas de los picos combinados. El algoritmo de integración SignalFinder, basado en un modelo de pico definido por el usuario, puede identificar consistentemente el pico de interés a todos los niveles de concentración, mientras que el algoritmo de integración MQ4 solo puede trazar una línea vertical desde el valle hasta la línea de referencia. Esto solo integra un pico parcial, lo cual introduce errores en el área del pico.

Figura 14-17 Picos de elución próxima



Elemento	Descripción
1	Pico de interés
2	Coelución del pico de fondo

Picos de bajada

Para picos de bajada, los algoritmos anteriores resultan a menudo inconsistentes al seleccionar el tiempo de retención en el que termina el pico. Dependiendo de la naturaleza exacta del ruido en esta región, dos picos con aspecto similar podrían registrar diferentes terminaciones de pico. La integración se puede hacer en general más consistente ajustando los parámetros de búsqueda de picos. Sin embargo, esto supone tiempo y trabajo. Al utilizar modelos, la integración se corta cuando el modelo cae por debajo de un umbral, con lo cual se ve mucho menos afectado por el ruido.

Picos saturados

Cuando el algoritmo detecta que un pico está saturado, utiliza un modelo para predecir el aspecto del pico si el detector no está saturado. Esto se muestra como un perfil rojo que va por encima del pico hasta aproximadamente la respuesta que se hubiera obtenido si no se hubiera saturado el detector. Esta función solo corrige la saturación del detector, y no la saturación de la fuente de iones o la saturación de la columna. La [Figura 14-18](#) muestra un ejemplo de corrección de saturación.

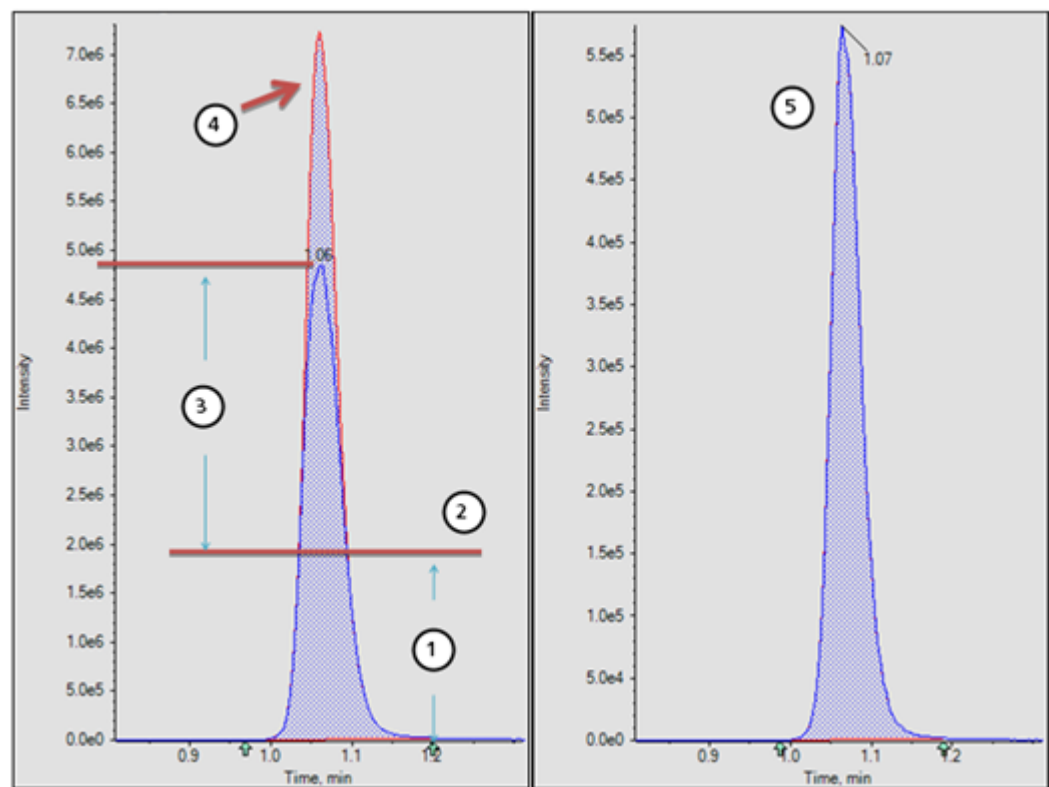
Antes de utilizar el algoritmo SignalFinder™, seleccione una muestra no saturada para usarla en la construcción de un modelo de pico. Después, ajuste el umbral de saturación a un valor apropiado para el detector. En este

Tutorial de flujo de trabajo de análisis de cuantificación

ejemplo, se usa un umbral de saturación de 1,8E+006 cps. El algoritmo hace coincidir la parte no saturada del pico restante, el pico por debajo de 1,8E+006 cps, con el modelo de pico. El algoritmo predice entonces el resto del pico indicado por el trazado rojo a partir del modelo de pico seleccionado.

Nota: El umbral de saturación depende de un número de factores entre los que se encuentra el tipo de detector, la edad del detector y el compuesto de interés. Para resultados óptimos, el umbral de saturación se debe ajustar adecuadamente.

Figura 14-18 Corrección de saturación del detector



Elemento	Descripción
1	Porción no saturada (modelo de pico con el que ajustar)
2	Umbral de 1,8e6 cps
3	Porción saturada
4	Perfil de pico corregido
5	Modelo de pico

Notas sobre el uso

Algunos flujos de trabajo no tienen una muestra típica que contenga todos los componentes de interés. Por ejemplo, en el trabajo de descubrimiento de medicamentos, los usuarios podrían buscar metabolitos de

oxidación sumando +16 a la masa Q1 del medicamento principal y +0 o +16 a la masa Q3. Estos metabolitos están presentes por lo general en algunas muestras, pero no necesariamente en la muestra escogida como modelo para crear el método de cuantificación. En este caso, el algoritmo SignalFinder™ utilizará un modelo por defecto si para una transición de MRM dada no existe un pico razonable en la muestra típica. En muchos casos este modelo predeterminado tendrá la precisión suficiente. Sin embargo, también es posible crear un modelo nuevo durante la revisión de picos subsiguiente utilizando una muestra que contenga el pico de interés.

Parámetros de integración del algoritmo SignalFinder™

Los siguientes parámetros se usan para identificar y registrar el pico de interés. Consulte [Parámetros del algoritmo de integración en la página 122](#) para obtener una lista completa de los parámetros disponibles.

Use Saturation Correction

Esta opción está disponible solamente cuando se configuran los valores predeterminados del algoritmo general y no durante la creación del método de cuantificación o la revisión de picos individual, ya que no es útil usar esta configuración para algunos picos solamente.

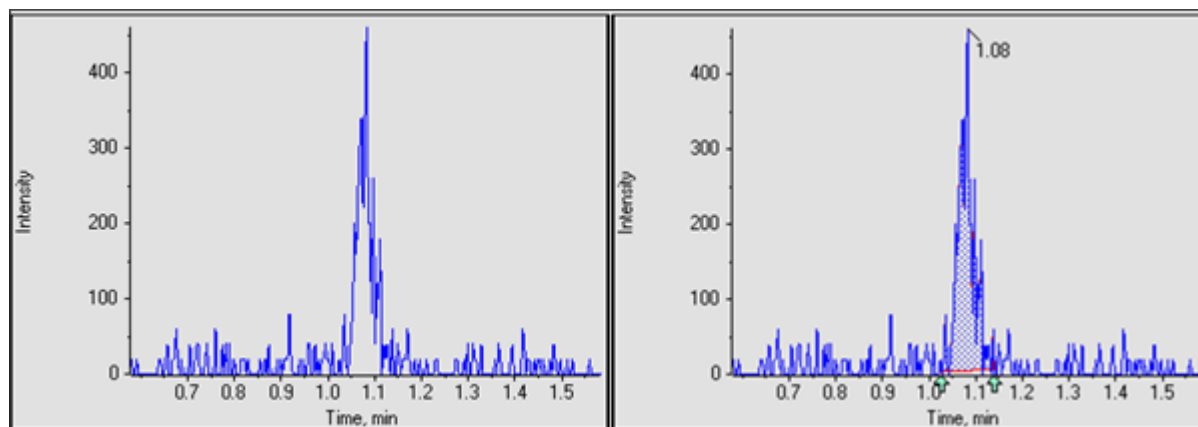
Saturation Threshold

Los picos por encima de este umbral se consideran saturados. Este valor depende del detector.

S/N Threshold

En la [Figura 14-19](#), si el umbral de señal/ruido se configura en siete (gráfico de la izquierda), entonces no se registra el pico. Si el umbral de señal/ruido se configura en dos (gráfico de la derecha), entonces se registra el pico. Este parámetro no afecta a la integración.

Figura 14-19 S/N Threshold



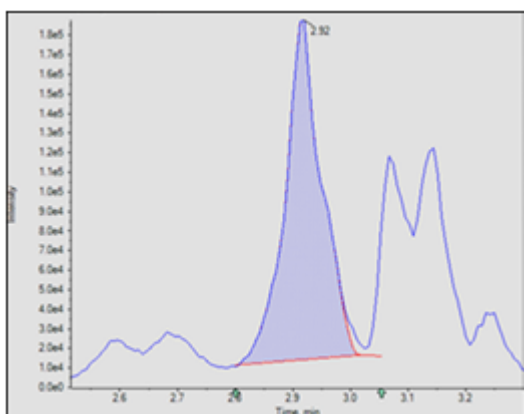
Confidence Threshold

Este parámetro se utiliza para filtrar picos potenciales que son falsos positivos. El valor predeterminado es 50 %, que es normalmente adecuado. Sin embargo, el usuario puede desear utilizar un valor más alto para datos con mucho ruido o para datos en los que el ancho del pico tiene una variación considerable de una muestra a otra.

La [Figura 14-20](#) y la [Figura 14-21](#) muestran cómo el **Confidence Threshold** afecta al número de picos identificados. Cuando el **Confidence Threshold** se configura en un 50 % el pico con un pequeño saliente se identifica como un pico único. Cuando el **Confidence Threshold** se baja al 16 %, el algoritmo SignalFinder™ encuentra dos picos. Arrastre el puntero sobre las regiones de los dos picos para visualizarlos.

Para determinar qué otros picos están potencialmente presentes en este único pico, y si no se conoce el **Confidence Threshold** correcto, pulse **Ctrl** y luego arrastre el puntero sobre la región de interés del pico. Esto descende automáticamente el **Confidence Threshold** para revelar el segundo pico de interés que no está presente cuando el **Confidence Threshold** está configurado en el 50 %.

Figura 14-20 50 % de umbral de confianza



Con un umbral de confianza del 16 %, se detectan dos picos. Arrastre el puntero sobre el área de los picos para identificarlos

Figura 14-21 16 % de umbral de confianza

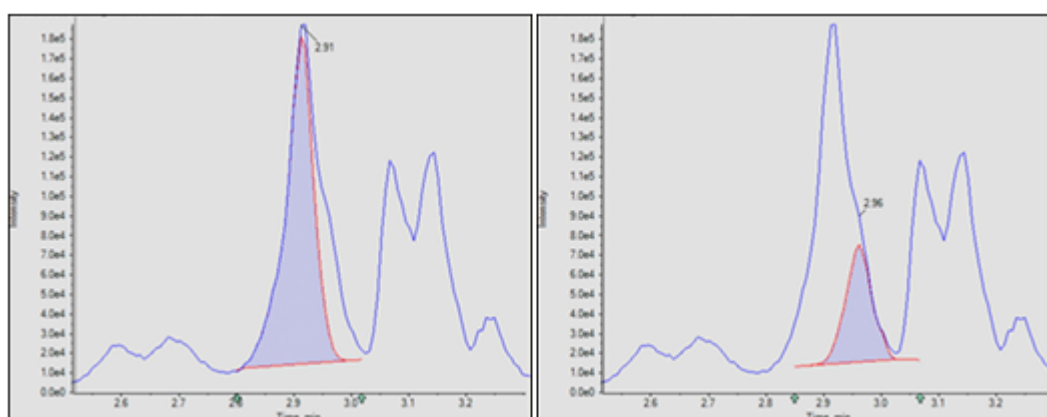
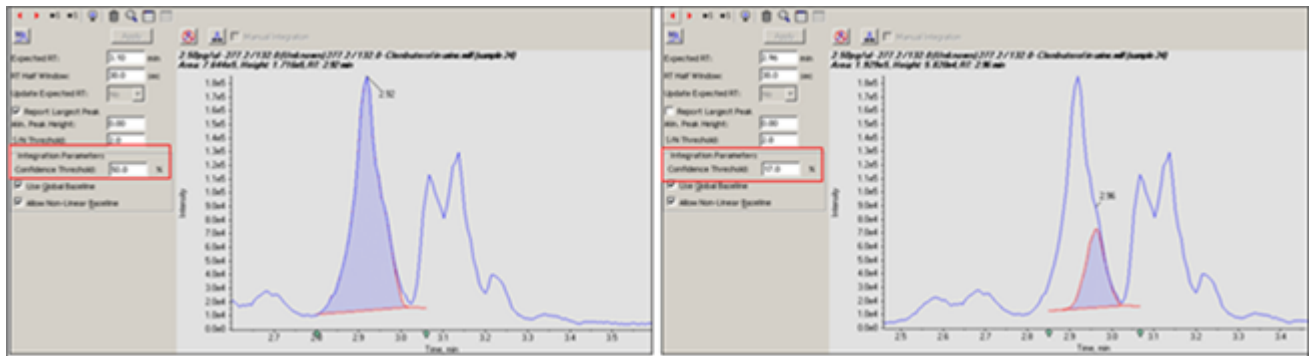


Figura 14-22 Parámetro de umbral de confianza

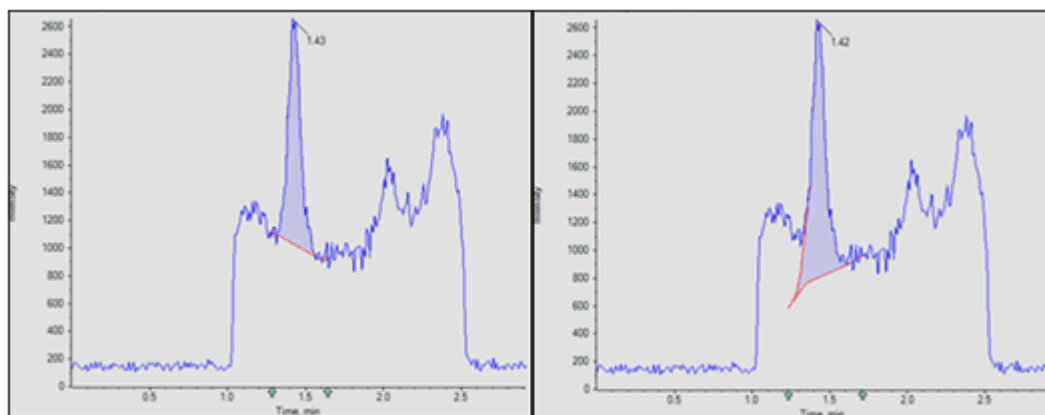


Use Global Baseline

Seleccione esta opción para utilizar el cromatograma entero como línea de referencia. Si la opción no está seleccionada, el software de cuantificación evalúa localmente los cambios realizados en la línea de referencia. La [Figura 14-23](#) muestra un ejemplo de cuándo se debe usar la línea de referencia.

El gráfico de la izquierda muestra un cromatograma que se integró correctamente usando la línea de referencia local. El gráfico de la derecha muestra el mismo cromatograma, integrado incorrectamente usando la línea de referencia global.

Figura 14-23 Use Global Baseline



Allow Non-Linear Baseline

Utilice esta opción para seleccionar entre una línea de referencia lineal o no lineal. Una línea de referencia no lineal estima la línea de referencia debajo de cada pico. La opción lineal encaja una línea entre los puntos al principio y al final de un grupo de picos específico. En la [Figura 14-24](#) y la [Figura 14-25](#) se muestran ejemplos de líneas de referencia lineales y no lineales para picos coeluidos. Los elementos 1 al 4 son picos convolucionados.

Se recomienda una línea de referencia no lineal para varios picos. Para un único pico, la diferencia entre lineal y no lineal es insignificante.

Figura 14-24 Ejemplo de una línea de referencia lineal

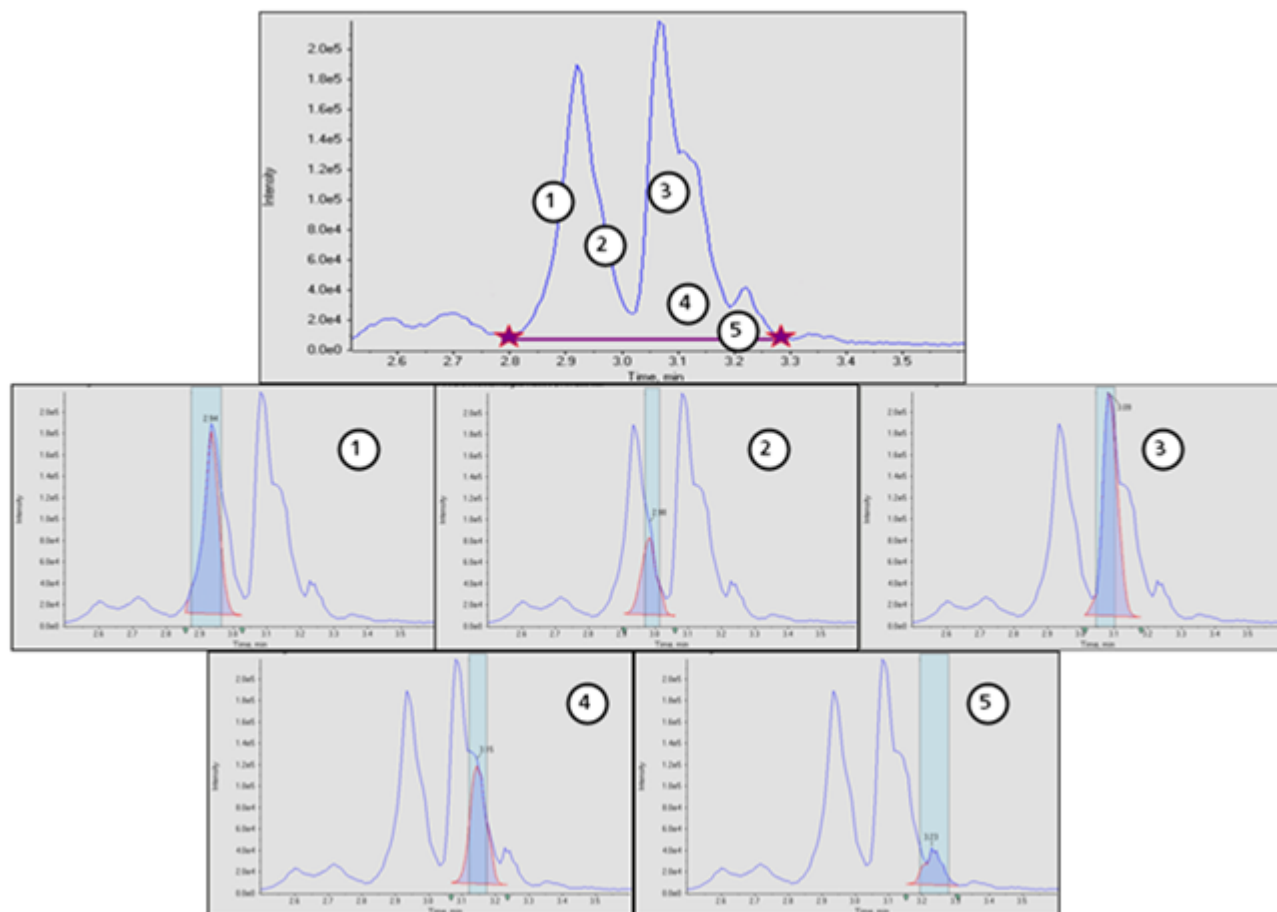
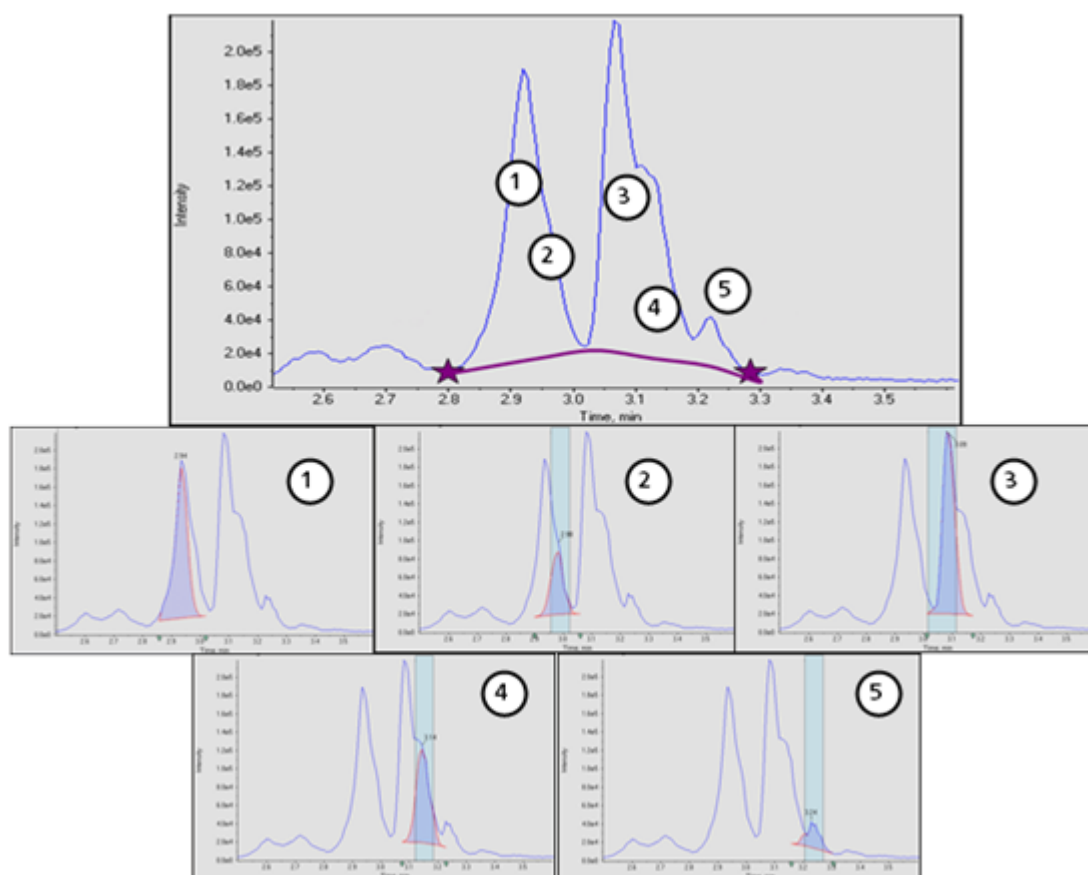


Figura 14-25 Ejemplo de una línea de referencia no lineal



Consejos para usar el algoritmo de integración SignalFinder™

- Unir dos picos: ocasionalmente, el algoritmo de integración SignalFinder detecta dos picos. Para unir los dos picos, pulse **Ctrl** y luego arrastre por los dos picos. El software intenta combinar los picos reduciendo la sensibilidad de circunvolución, a no ser que los dos picos estén demasiado separados.
- Cambiar los tiempos de inicio y final del pico: para cambiar los tiempos de inicio y final del pico, bien creando una **Results Table**, bien durante la revisión de picos, arrastre las flechas de inicio y final del pico.

Nota: El usuario solo puede cambiar las fechas de inicio y final dentro de unos límites razonables.

Parámetros del algoritmo de integración MQ4

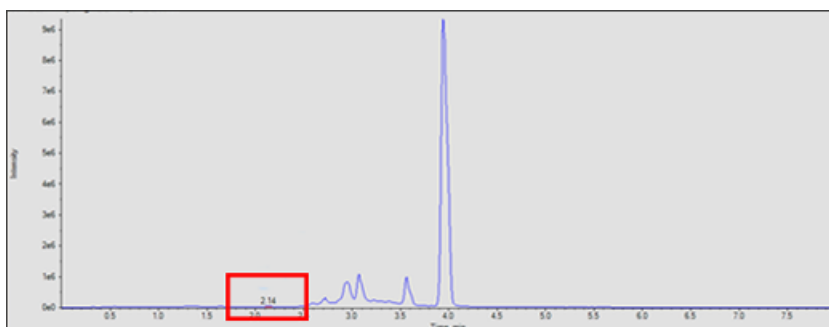
Los siguientes parámetros se usan para identificar y registrar el pico de interés. Consulte [Parámetros del algoritmo de integración en la página 122](#) para obtener una lista completa de los parámetros disponibles.

Noise Percentage

Este parámetro se utiliza para estimar el nivel de ruido en los cromatogramas. El porcentaje especificado de los puntos de datos con la intensidad más baja se considera ruido.

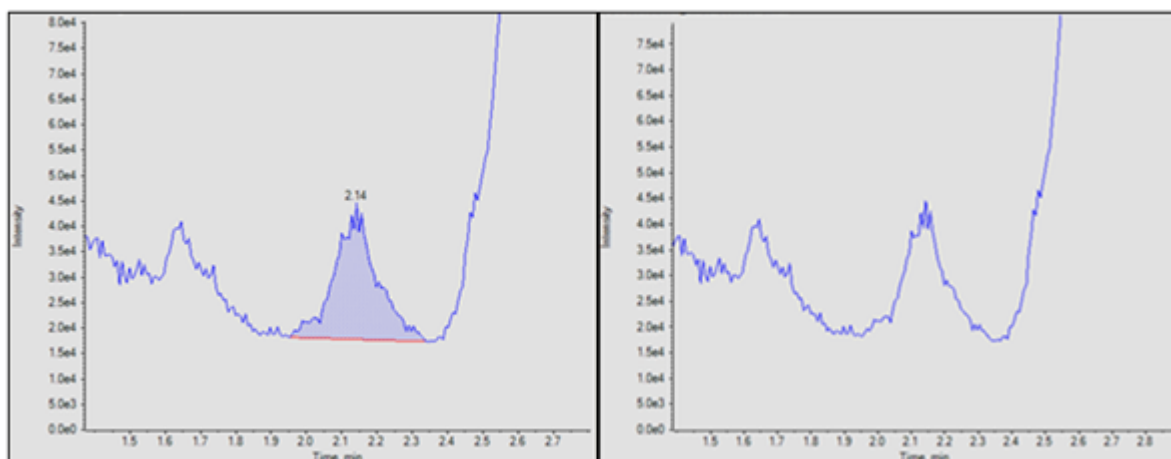
Los valores típicos oscilan entre el 20 % y el 60 %. Si no se detectan picos pequeños en presencia de picos de mayor tamaño, debe disminuirse el porcentaje de ruido. La [Figura 14-26](#) es un ejemplo de un pico pequeño en presencia de un pico extremadamente grande. Este pico no se detecta cuando el porcentaje de ruido está configurado en el 90 %, pero sí cuando el porcentaje de ruido está configurado en el 40 %.

Figura 14-26 Pico de interés



En la [Figura 14-27](#), el gráfico de la izquierda muestra el porcentaje de ruido configurado en el 40 %. El gráfico de la derecha está configurado en el 90 %.

Figura 14-27 Niveles de ruido

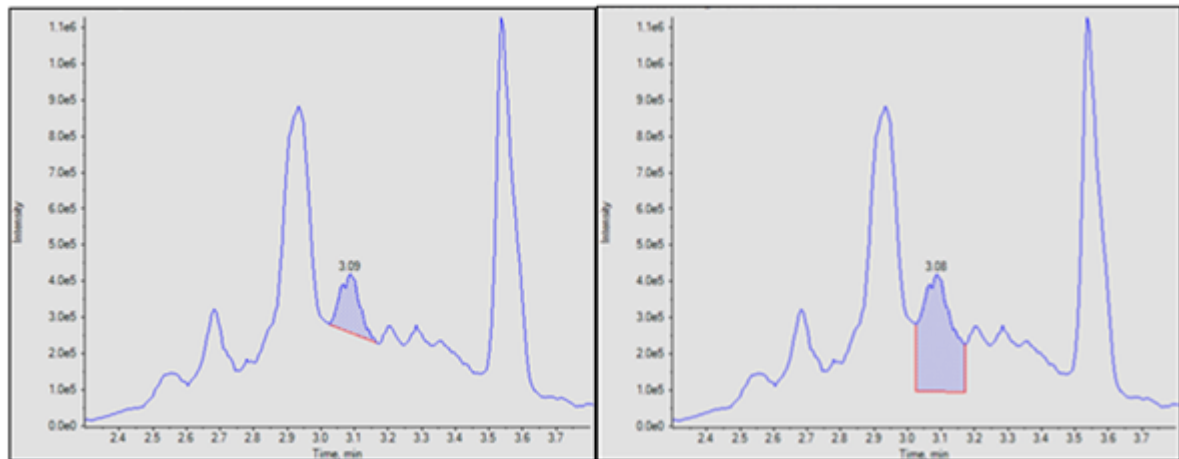


Baseline Sub. Window

Después del suavizado, pero antes de realizar otro procesamiento, se sustrae la línea de referencia de los cromatogramas para eliminar los salientes en los datos. Para cada punto de datos, la línea de referencia se calcula con los puntos de datos a la izquierda y a la derecha del punto actual con intensidad mínima (dentro de la ventana de sustracción).

El valor exacto de este parámetro no es de importancia crítica, siempre que esté definido al menos con un tamaño varias veces mayor que el ancho esperado de los picos.

Figura 14-28 Ventana de sustracción de línea de referencia



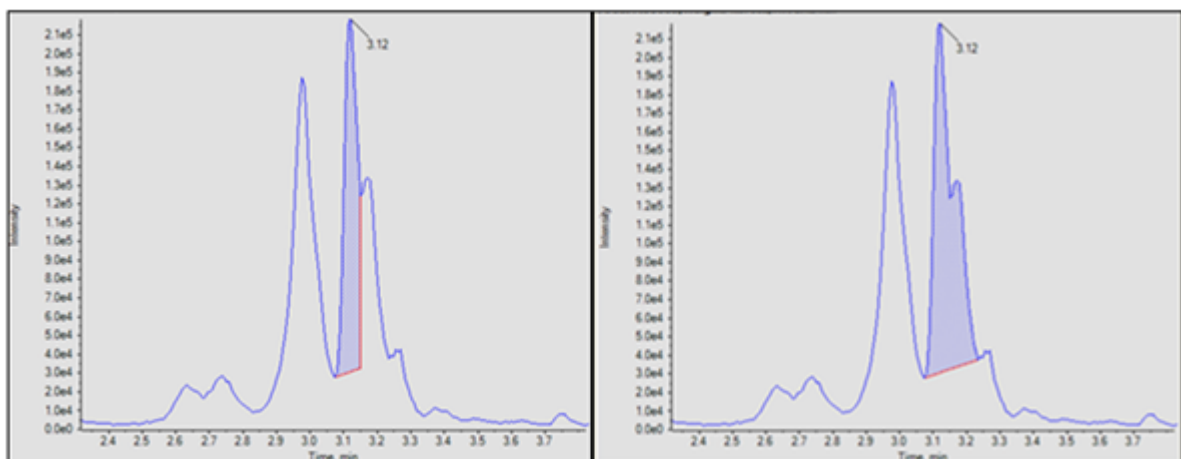
Peak Splitting

Este parámetro controla si se detecta un pico potencialmente ruidoso como un único pico o como dos (o más) picos independientes. Si la «caída» entre dos picos potenciales es inferior al valor especificado, se detecta un único pico. En caso contrario, se detectan dos.

Al establecer este parámetro con un valor alto, se evita que se dividan y se detecten los picos ruidosos como dos picos independientes. No obstante, debe utilizarse un valor más bajo en caso de que haya dos picos distintos de elución cercanos (solapándose).

El gráfico de la izquierda muestra la división de picos configurada en dos puntos. El gráfico de la derecha muestra la división de picos configurada en tres puntos.

Figura 14-29 División de picos



Tareas opcionales

Esta sección contiene tareas opcionales que se pueden usar para mejorar el análisis de datos.

Crear gráficos de métricas

Utilice un **Metric Plot** para representar los valores en una columna de la **Results Table** contrastados con el número de fila u otra columna. Estos gráficos son una ayuda valiosa para la revisión visual de los datos, especialmente si no hay que revisar todos los cromatogramas manualmente usando el panel **Peak Review**.

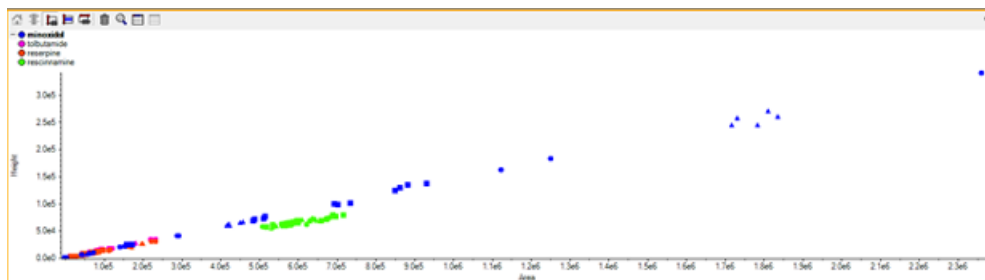
Nota: Los gráficos de métricas utilizan las mismas fórmulas de regresión que las curvas de calibración. Para los gráficos de métricas hay dos fórmulas adicionales, promedio y mediana.

1. Abra una **Results Table**.
2. Seleccione una o dos columnas y luego haga clic en el icono **Metric Plot**. Para este ejemplo, seleccione la columna **IS Area**.

Si se selecciona una columna, el gráfico resultante muestra los valores de una columna como una función del número de fila de la tabla. Si se seleccionan dos columnas, se representan los valores de las columnas contrastados entre sí. La primera de las dos columnas para seleccionar contiene los valores de x y la segunda los valores de y.

3. Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Show Legend** para ver una explicación de los símbolos utilizados por el gráfico.

Figura 14-30 Gráfico de métricas



Crear columnas personalizadas

1. Con una **Results Table** abierta y activa, haga clic con el botón derecho y luego clic en **Add Custom Column**.

Se agrega una columna al final de la tabla.

2. Escriba el nombre de la columna en el cuadro de diálogo **Custom Column Name**.
3. Haga clic en **OK**.

Acerca de los archivos de métodos de cuantificación y métodos integrados

Los métodos de cuantificación se pueden crear usando una de las siguientes opciones:

- Utilizar el **Quantitation wizard**.
- Editar un método existente en el **Quantitation wizard** con la casilla de verificación **Edit** seleccionada.
- Abrir y editar un método de cuantificación existente.

Los métodos de cuantificación están guardados en la carpeta **Quantitation Method**.

Cuando se crea una **Results Table**, el método de cuantificación usado para crear la **Results Table** está incluido en la **Results Table**. Edite el método de cuantificación integrado; sin embargo, cualquier cambio en el método de cuantificación se aplica solamente al método integrado en la **Results Table** y no a los métodos de la carpeta **Quantitation Method**.

¡Sugerencia! Este método integrado modificado se puede exportar para usarlo más adelante.

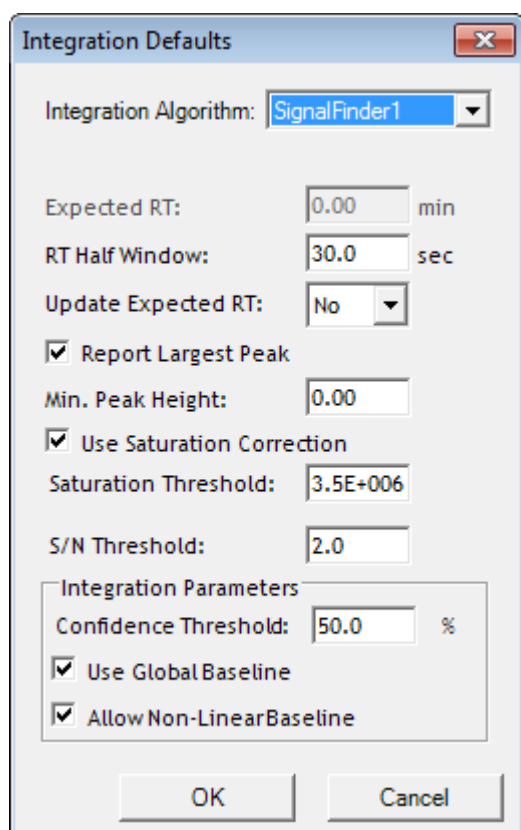
Parámetros del algoritmo de integración

A

Parámetros del algoritmo de integración SignalFinder

El SignalFinder™ construye un modelo de pico utilizando la muestra seleccionada al crear un nuevo método de cuantificación. Este modelo describe la forma del pico seleccionado, utilizada para preparar el algoritmo.

Figura A-1 Cuadro de diálogo Integration Defaults



Parámetros del algoritmo de integración

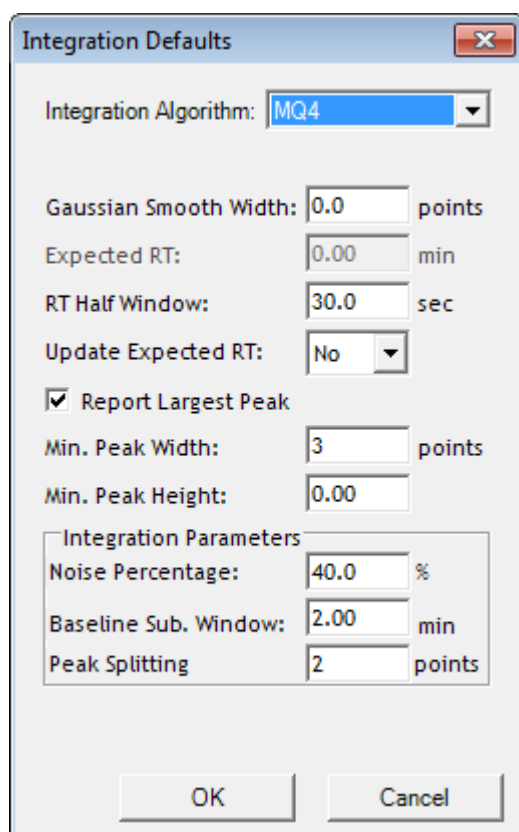
Etiqueta	Descripción
Integration Algorithm	El algoritmo de integración seleccionado.
Expected RT	El tiempo de retención esperado en minutos. Esta opción está inicialmente definida con el tiempo de retención del pico más grande del cromatograma para la muestra representativa que se utilizó para construir el método de cuantificación. Este campo no es editable. Se actualiza en función del compuesto en el método de cuantificación.
RT Half Window	La mitad de la ventana del tiempo de retención total en segundos. Para detectar y registrar un pico, la diferencia entre el ápice y el tiempo de retención esperado debe ser inferior o igual a este valor.
Update Expected RT	<p>Indica si el tiempo de retención esperado debe ajustarse sobre la marcha utilizando otros componentes. Hace uso de información adicional para compensar los cambios en el tiempo de retención de muestra a muestra. Las opciones son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No: se utiliza el tiempo de retención esperado tal cual está. • Group: aplicable para componentes que se han asignado a grupos para los que todos los componentes para un determinado grupo tienen el mismo tiempo de retención (es decir, diferentes transiciones para el mismo compuesto). Se actualiza el tiempo de retención con la posición de la superposición máxima de los cromatogramas individuales para el grupo (para una muestra determinada) dentro de la ventana de tiempo de retención. La idea es configurar el tiempo de retención esperado al tiempo de retención probable para el componente de interés real (donde se espera que haya un pico en cada cromatograma). <p>Si hay al menos dos patrones internos definidos para un grupo, entonces solo se utilizan sus cromatogramas para determinar el nuevo tiempo de retención. En caso contrario, se utilizan todos los cromatogramas para el grupo. La intención es utilizar solo aquellos cromatogramas para los que el componente tenga mayor probabilidad de estar presente a un nivel razonable.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS: para analitos que utilicen un patrón interno, se determina en primer lugar el tiempo de retención real del pico del patrón interno (para la muestra correspondiente). El tiempo de retención esperado para el analito se determina multiplicando el tiempo de retención especificado por la proporción del tiempo de retención real frente al esperado para el patrón interno. En ocasiones se alude a esta función como tiempo de retención relativo. <p>Nota: Esta opción no se aplica a patrones internos ni a analitos que no utilizan un patrón interno.</p>

Parámetros del algoritmo de integración

Etiqueta	Descripción
Report Largest Peak	<p>Si se encuentra más de un pico en un cromatograma, dentro de la ventana de tiempo de retención y cumpliendo con la anchura y altura mínimas, este parámetro controla qué pico se registra. Cuando esta casilla de verificación está seleccionada, se registra el pico con el área más grande. Cuando esta casilla de verificación no está seleccionada, se registra el pico con el tiempo de retención más próximo al tiempo esperado.</p> <p>Se recomienda activar esta función a no ser que los tiempos de retención sean muy reproducibles.</p>
Min. Peak Height	Este parámetro no afecta a la integración. Se utiliza solo para los informes. Cualquier pico potencial que sea menos intenso que este valor no se considera de interés y no se utiliza.
Use Saturation Correction	Cuando el algoritmo detecta que un pico está saturado, utiliza el modelo para predecir el aspecto del pico si el detector no está saturado. Esto hace que el perfil se extienda por encima del ápice del pico hasta aproximadamente la respuesta que se hubiera obtenido si no se hubiera saturado el detector. Esto puede ampliar el rango dinámico lineal de las curvas de calibración. Esta opción está disponible solamente cuando se configuran los valores predeterminados del algoritmo general y no durante la creación del método de cuantificación o la revisión de picos individual, ya que no es útil usar esta configuración para algunos picos solamente.
Saturation Threshold	Los picos por encima de este umbral se consideran saturados. Este valor depende del detector.
S/N Threshold	Este parámetro no afecta a la integración. Se utiliza solo para los informes. Los picos por debajo del umbral no se registran.
Confidence Threshold	Se utiliza para filtrar picos potenciales que son falsos positivos. El valor predeterminado es 50 %, que es normalmente adecuado. Sin embargo, se puede utilizar un valor más alto para los datos con mucho ruido o para datos en los que el ancho del pico tiene una variación considerable de muestra a muestra.
Use Global Baseline	Seleccione esta opción para utilizar el cromatograma entero como la línea de referencia. Si la casilla de verificación no está seleccionada, el software evalúa localmente los cambios realizados en la línea de referencia.
Allow Non-Linear Baseline	Seleccione entre una línea de referencia lineal o no lineal. Una línea de referencia no lineal estima la línea de referencia debajo de cada pico. Una línea de referencia lineal encaja una línea entre los puntos en el principio y el final de ese grupo específico de picos.

Parámetros del algoritmo de integración MQ4

Figura A-2 Cuadro de diálogo Integration Defaults



Etiqueta	Descripción
Integration Algorithm	El algoritmo de integración seleccionado.
Gaussian Smoothing Width	Se aplica un algoritmo de suavizado gaussiano estándar con una mitad de anchura igual al valor especificado (en puntos). Para cromatogramas con ruido, un valor cercano a la anchura real del pico (a media altura) es una buena opción. Para datos con menos ruido se puede utilizar un valor más pequeño.
Expected RT	El tiempo de retención esperado, en minutos. Esta opción está inicialmente definida con el tiempo de retención del pico más grande del cromatograma para la muestra representativa que se utilizó para construir el método de cuantificación.
RT Half Window	La mitad de la ventana del tiempo de retención total en segundos. Para detectar y registrar un pico, la diferencia entre el ápice y el tiempo de retención esperado debe ser inferior o igual a este valor.

Parámetros del algoritmo de integración

Etiqueta	Descripción
Update Expected RT	<p>Indica si el tiempo de retención esperado debe ajustarse sobre la marcha utilizando otros componentes. Hace uso de información adicional para compensar los cambios en el tiempo de retención de muestra a muestra. Las opciones son:</p> <ul style="list-style-type: none">• No: se utiliza el tiempo de retención esperado tal cual está.• Group: aplicable para componentes que se han asignado a grupos para los que todos los componentes para un determinado grupo tienen el mismo tiempo de retención (es decir, diferentes transiciones para el mismo compuesto). Se actualiza el tiempo de retención con la posición de la superposición máxima de los cromatogramas individuales para el grupo (para una muestra determinada) dentro de la ventana de tiempo de retención. La idea es configurar el tiempo de retención esperado al tiempo de retención probable para el componente de interés real (donde se espera que haya un pico en cada cromatograma). <p>Si hay al menos dos patrones internos definidos para un grupo, entonces solo se utilizan sus cromatogramas para determinar el nuevo tiempo de retención. En caso contrario, se utilizan todos los cromatogramas para el grupo. La intención es utilizar solo aquellos cromatogramas para los que el componente tenga mayor probabilidad de estar presente a un nivel razonable.</p> <ul style="list-style-type: none">• IS: para analitos que utilicen un patrón interno, se determina en primer lugar el tiempo de retención real del pico del patrón interno (para la muestra correspondiente). El tiempo de retención esperado para el analito se determina multiplicando el tiempo de retención especificado por la proporción del tiempo de retención real frente al esperado para el patrón interno. En ocasiones se alude a esta función como tiempo de retención relativo.
Report Largest Peak	<p>Si se encuentra más de un pico en un cromatograma, dentro de la ventana de tiempo de retención y cumpliendo con la anchura y altura y mínima, este parámetro controla qué pico se registra. Cuando esta casilla de verificación está seleccionada, se registra el pico con el área más grande. Cuando esta casilla de verificación no está seleccionada, se registra el pico con el tiempo de retención más próximo al tiempo esperado.</p> <p>Se recomienda activar esta función a no ser que los tiempos de retención sean muy reproducibles.</p>
Min. Peak Height	<p>Este parámetro no afecta a la integración. Se utiliza solo para los informes. Cualquier pico potencial que sea menos intenso que este valor no se considera de interés y no se utiliza.</p>
Min. Peak Width	<p>Cualquier pico potencial que sea más estrecho que este valor se interpreta como ruido y no se utiliza.</p>

Parámetros del algoritmo de integración

Etiqueta	Descripción
Noise Percentage	<p>Este parámetro se utiliza para estimar el nivel de ruido en los cromatogramas. El porcentaje especificado de los puntos de datos con la intensidad más baja se considera ruido.</p> <p>Los valores típicos oscilan entre el 20 % y el 60 %. Si los picos pequeños no se detectan en presencia de picos de mayor tamaño, debe disminuirse este valor.</p>
Baseline Sub. Window	<p>Después del suavizado, pero antes de realizar otro procesamiento, se sustrae la línea de referencia de los cromatogramas para eliminar los salientes en los datos. Para cada punto de datos, la línea de referencia se calcula con los puntos de datos a la izquierda y a la derecha del punto actual con intensidad mínima (dentro de la ventana de sustracción).</p> <p>El valor exacto de este parámetro no es de importancia crítica, siempre que esté definido al menos con un tamaño varias veces mayor que el ancho esperado de los picos.</p>
Peak Splitting	<p>Este parámetro controla si se detecta un pico potencialmente ruidoso como un único pico o como dos (o más) picos independientes. Si la «caída» entre dos picos potenciales es inferior al valor especificado, se detecta un único pico. En caso contrario, se detectan dos.</p> <p>Al establecer este parámetro con un valor alto, se evitará que se dividan y se detecten los picos con ruido como dos picos independientes. No obstante, debe utilizarse un valor más bajo en caso de que haya dos picos distintos de elución cercanos (solapándose).</p>

Ecuaciones de regresión

B

Esta sección describe las ecuaciones utilizadas para calcular las curvas de regresión. En las siguientes ecuaciones, x representa la concentración del analito para muestras **Standard**, y representa el área o la altura del pico correspondiente. Las variables exactas utilizadas para la regresión dependen de si se está utilizando un patrón interno y si el área o la altura del pico se utilizan de acuerdo con la [Tabla B-1](#).

Tabla B-1 Variables de regresión

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

donde:

- C_a = concentración real del analito
- C_{is} = concentración del patrón interno
- DF = factor de dilución
- A_a = área de pico del analito
- A_{is} = área de pico del patrón interno
- H_a = altura de pico del analito
- H_{is} = altura de pico del patrón interno

Factores de ponderación

La [Tabla B-2](#) muestra cómo se calcula el factor de ponderación (w en las ecuaciones siguientes) para cada uno de los siete tipos de ponderación.

Tabla B-2 Factores de ponderación

Tipo de ponderación	Ponderación (w)
Ninguno	Siempre 1,0.
1/x	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^5$. Si no, $w = 1 / x $.
1 / x ²	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^{10}$. Si no, $w = 1 / x^2$.
1 V/m	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^8$. Si no, $w = 1 / y $.
1 / y ²	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^{16}$. Si no, $w = 1 / y^2$.
ln x	Si $x < 0$, entonces se genera un error. Si $x < 10^{-5}$, entonces $w = \ln 10^5$. Si no, $w = \ln x $.
ln y	Si $y < 0$, entonces se genera un error. Si $y < 10^{-8}$, entonces $w = \ln 10^8$. Si no, $w = \ln y $.

Regresiones

Esta sección proporciona las ecuaciones para cada uno de los tipos de regresión. En las ecuaciones siguientes, las variables «x», «y» y «w» tienen la definición especificada anteriormente. Se calculan todas las sumas para todas las muestras de tipo **Standard**, salvo las muestras **Standard** marcadas como no utilizadas.

El coeficiente de correlación se calcula de la manera siguiente:

$$r = (\sum w \sum w y y_c - \sum w y \sum w y_c) / \sqrt{(D_y D_{y_c})}$$

donde:

$$D_y = \sum w \sum w y^2 - (\sum w y)^2$$

y_c = valor de y calculado con la ecuación correspondiente que se detalla a continuación

$$D_{y_c} = \sum w \sum w y_c^2 - (\sum w y_c)^2$$

Linear

La ecuación de calibración lineal es la siguiente:

$$y = mx + b$$

La pendiente y la intersección se calculan así:

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

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

donde:

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

Lineal a cero

La ecuación de calibración lineal a cero es la siguiente:

$$y = mx$$

La pendiente se calcula así:

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

Factor de respuesta promedio

La calibración del factor de respuesta promedio es:

$$y = mx$$

Esta es la misma ecuación para el caso de lineal a cero. Sin embargo, la pendiente se calcula de forma diferente:

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

y la desviación estándar del factor de respuesta como:

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

donde:

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

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

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

Cuadrática

La ecuación de calibración cuadrática es la siguiente:

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

Los coeficientes polinomiales se calculan así:

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

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

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

donde:

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

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

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

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

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

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

Potencia

La ecuación de calibración de la función de potencia es:

$$y = ax^p$$

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

$$a = e^b$$

$$p = m$$

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

Wagner

La ecuación de calibración Wagner es la siguiente:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Las ecuaciones para la calibración cuadrática se utilizan como se ha descrito anteriormente para calcular un₀, un₁ y un₂, excepto que en estas ecuaciones x se sustituye por ln x e y se sustituye por ln y.

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

Hill

La ecuación de calibración Hill es la siguiente:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

No es posible proporcionar una función analítica para resolver a, b, c y n. En lugar de eso, los coeficientes se determinan usando el método iterativo Levenberg-Marquardt.

Calcular las concentraciones finales

Esta sección explica cómo calcular la concentración final a partir de las ecuaciones de regresión resultantes, usando la concentración de los patrones internos y el factor de dilución usado en la concentración original.

Lineal

$$x = (y - b) / m$$

Lineal a cero y factor de respuesta promedio

$$x = y / m$$

Cuadrática

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0.5}) / (2 \times a_2)$$

- Si las raíces + y - están dentro del rango de los patrones, entonces se genera un error, ya que no hay una solución única.
- Si exactamente una de las dos raíces está dentro del rango de concentración de los patrones, entonces se registra ese valor.
- Si ambas raíces están por debajo del patrón de concentración más bajo, entonces se registra la raíz +.
- Si ambas raíces están por encima del patrón de concentración más alto, entonces se registra la raíz -.
- Si la raíz - está por debajo del patrón más bajo y la raíz + está por encima del patrón más alto, entonces se registra la raíz - si la diferencia con el patrón de concentración más bajo es menor que la diferencia entre la raíz + y la concentración más alta. Si no, se registra la raíz +.

Potencia

$$x = (y / a)^{(1 / p)}$$

Wagner

La misma ecuación para el caso cuadrático se utiliza para el cálculo principal, salvo que x se sustituye por ln x e y se sustituye por ln y.

Hill

$$x = ((a - y \times c) / (y - b))^{(1 / n)}$$

Esta sección describe cómo usar la funcionalidad de generación de informes del software para crear informes con formato a partir de las **Results Tables**.

Crear informes

Este software utiliza documentos de Microsoft Word como plantillas predefinidas. Al crear un informe, los valores se extraen de la tabla de resultados más reciente y de los archivos asociados.

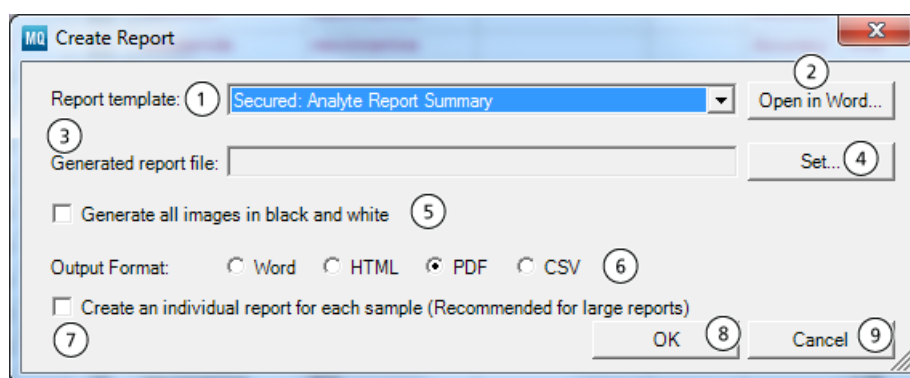
Los usuarios son los responsables de validar plantillas personalizadas. El usuario puede editar el formato de número en el editor de plantillas de informes. Si el formato de número no está especificado en la plantilla, en el informe se utiliza el formato de **Column Setting** de la **Results Table**. Asegúrese de que está usando el número correcto de posiciones decimales.

Las formas controladas de generar datos de salida desde el software consisten en exportar **Results Tables**, transferir a LIMS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las **Results Tables**, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar los métodos de salida no controlados para fines regulados.

Desplácese a cualquier carpeta para acceder a ella y almacenar datos. Las ubicaciones anteriores desde las que se abrieron las plantillas y se guardaron los informes se abren de manera predeterminada.

1. Abra una **Results Table**.
2. Haga clic en **File > Create Report and Save Results Table**.

Figura C-1 Cuadro de diálogo Create Report



Elemento	Descripción
1	Report template: seleccione una plantilla de la lista..
2	Open in Word: haga clic para abrir la plantilla de informe especificada directamente en Microsoft Word y verificarla o editarla.
3	Generated report file: muestra el nombre del archivo de informe.
4	Set: haga clic para especificar el nombre de archivo del informe que se vaya a generar.
5	Generate all images in black and white: seleccione la casilla de verificación para imprimir en blanco y negro.
6	Output Format: Word, HTML, PDF o CSV. El formato PDF es el más seguro, ya que no se puede editar el informe.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports): haga clic para crear un informe individual para cada muestra
8	Haga clic en OK para imprimir el informe.
9	Haga clic en Cancel para cerrar el cuadro de diálogo sin crear un informe.

3. Seleccione una plantilla de la lista Report template. Las plantillas de informe se guardan en las siguientes ubicaciones:

- Para Windows 7 y 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Consulte [Plantillas de informes en la página 136](#) para ver una descripción de las plantillas.

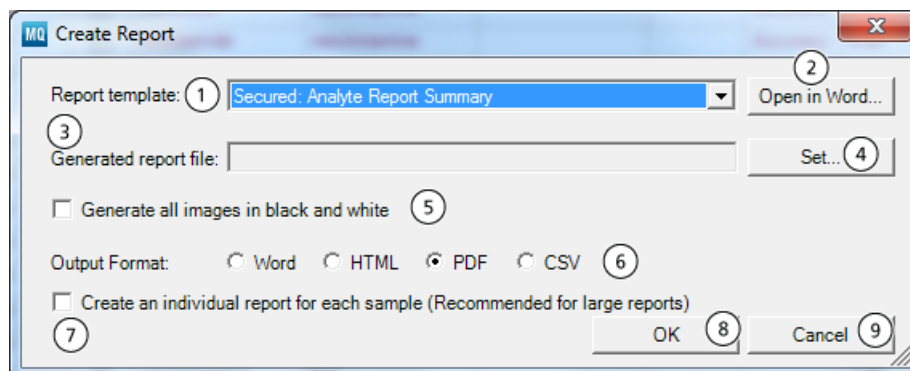
4. Haga clic en **Set** para crear el nombre y ubicación del informe.
5. Haga clic en **OK** para generar el informe.

Crear plantillas de informes personalizadas

Las formas controladas de generar datos de salida desde el software consisten en exportar **Results Tables**, transferir a LIMS y crear informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las **Results Tables**, no están controlados. Los usuarios no deberían utilizar los métodos de salida no controlados para fines regulados.

1. Abra o cree una **Results Table**.
2. Haga clic en **File > Create Report and Save Results Table**.

Figura C-2 Cuadro de diálogo Create Report



Elemento	Descripción
1	Report template: seleccione una plantilla de la lista..
2	Open in Word: haga clic para abrir la plantilla de informe especificada directamente en Microsoft Word y verificarla o editarla.
3	Generated report file: muestra el nombre del archivo de informe.
4	Set: haga clic para especificar el nombre de archivo del informe que se vaya a generar.
5	Generate all images in black and white: seleccione la casilla de verificación para imprimir en blanco y negro.
6	Output Format: Word, HTML, PDF o CSV. El formato PDF es el más seguro, ya que no se puede editar el informe.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports) : haga clic para crear un informe individual para cada muestra
8	Haga clic en OK para imprimir el informe.
9	Haga clic en Cancel para cerrar el cuadro de diálogo sin crear un informe.

3. Seleccione una plantilla de la lista **Report template**.

4. Haga clic en **Open in Word**.

Se abre la plantilla docx y se muestra el editor de plantillas Reporter a la derecha. El editor de plantillas se rellena de forma automática con la información de etiquetas.

5. Edite la plantilla según sea necesario.

6. Guarde la plantilla.

Plantillas de informes

La tabla siguiente describe las plantillas disponibles en <unidad>\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Cuando se crea una plantilla personalizada, el usuario es responsable de validarla. El usuario puede editar el formato de número en el editor de plantillas de informes. Si el formato de número no está especificado en la plantilla, en el informe se utilizará el formato del cuadro de diálogo **Results Table Column Settings**. Es responsabilidad del usuario validar la plantilla de informe personalizada.

Algunas plantillas de informe utilizan consultas. Los usuarios pueden crear consultas utilizando fórmulas de Microsoft Excel para evaluar, manipular y presentar los datos de la tabla de resultados en un informe. La etiqueta MetaField de la plantilla de informe indica al informe el nombre del archivo query que debe usar. Para utilizar las consultas, hay que especificar el nombre del archivo de la consulta en la etiqueta MetaField de la plantilla de informe. Las consultas también deberán tener la extensión «.query» para que se reconozcan como tales. Las consultas se deberán guardar en la carpeta de Reporter en la que se guardan las plantillas de informe.

Recomendamos que el usuario valide los resultados generados cuando se haga uso de una plantilla Reporter, especialmente cuando se utilicen consultas en una plantilla. Si se realizan modificaciones en la plantilla de informe después de la validación, se deberá volver a validar la plantilla de informe. Los cambios en la plantilla de informe incluyen cualquier modificación realizada en etiquetas o consultas de Reporter.

Tabla C-1 Descripciones de la plantilla de informes

Plantilla	Descripción
Analyte Report Summary	Informe seguro que muestra una tabla resumen de muestras para cada analito. Esta plantilla de informe es adecuada para una tabla de resultados con grupos definidos.
Calibration Curves Template	Informe que muestra información del archivo, tabla de estadísticas (patrones) y curva de calibración para analitos, una página por analito.
Metric Plot_IS Area	Informe seguro que muestra, para cada patrón interno, una sección que incluye información del archivo y un gráfico de métricas del área del pico del patrón interno.
Per Analyte Ion Ratio Report	Informe seguro que muestra, para cada analito, una sección que incluye información de archivo, tabla de resultados, curvas de calibración para cada analito y cromatogramas, incluyendo el patrón interno y cada analito. Esta plantilla es adecuada para una tabla de resultados con grupos definidos.
Per Analyte Report	Informe seguro que muestra, para cada analito, una sección que incluye información de archivo, tabla de resultados, curvas de calibración para cada analito y cromatogramas, incluyendo el patrón interno y cada analito. Esta plantilla es adecuada para una tabla de resultados sin grupos definidos.
Per Sample Ion Ratio Report	Informe seguro que muestra, para cada muestra, una sección que incluye información de archivo, información de muestra, tablas de resultados de analitos, curvas de calibración para cada analito y cromatogramas, incluyendo el patrón interno y cada analito. Esta plantilla es adecuada para una tabla de resultados con grupos definidos.

Tabla C-1 Descripciones de la plantilla de informes (continuación)

Plantilla	Descripción
Per Sample Report	Informe seguro que muestra, para cada muestra, una sección que incluye información de archivo, información de muestra, tablas de resultados de analitos, curvas de calibración para cada analito y cromatogramas, incluyendo el patrón interno y cada analito. Esta plantilla es adecuada para una tabla de resultados sin grupos definidos.
Sample Report Summary	Informe seguro que muestra una tabla de resumen de analitos para cada muestra. Esta plantilla de informe es adecuada para una tabla de resultados con grupos definidos.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Informe que muestra, para cada muestra desconocida, información del archivo, información de la muestra y una tabla de resumen de resultados. La tabla resumen de resultados incluye umbrales de concentración específicos del analito. Los analitos se marcan como positivos si la concentración se encuentra por encima del umbral. Esta plantilla se refiere al archivo Sample Report With Concentration Threshold.query. El usuario puede editar el archivo de consulta para especificar los nombres de analito, los grupos de analitos (por ejemplo, clase de compuesto) y los umbrales de concentración del analito.

Etiquetas de plantillas de informes

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Etiquetas del esquema del proveedor de datos del software Analyst [®] MD		
Analyte	ForEach	Pasa en bucle por todos los analitos, en el orden definido en la tabla de resultados.
AnalyteGroup	ForEach	Pasa en bucle solamente por los diferentes grupos de analitos. Las etiquetas TextField o PictureField obtienen valores para el ion cuantificador. Si las etiquetas de este tipo contienen una etiqueta adicional For_Each especificando el atributo Ratiolons, entonces el bucle interno es solo para iones de cuantificador que formen parte del grupo actual.
InternalStandard	ForEach	Pasa en bucle por todos los patrones internos.
QCStatistics	ForEach	Pasa en bucle por todas las estadísticas de control de calidad.
Ratiolons	ForEach	Consulte AnalyteGroup.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Sample	ForEach	Pasa en bucle por cada muestra individual. Esto se usa, por ejemplo, en conjunción con una configuración de etiqueta TextField para insertar el nombre de la muestra.
Statistics	ForEach	Pasa en bucle por todas las estadísticas de patrones.
MQ_Group	ForEach	Pasa en bucle por los distintos grupos, incluyendo grupos o subgrupos de patrones internos. Las etiquetas TextField o PictureField obtienen valores para el ion cuantificador. Si las etiquetas de este tipo contienen una etiqueta adicional For_Each especificando el atributo Ratiolons, entonces el bucle interno es solo para iones de cuantificador que formen parte del grupo actual.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Consulte MQ_Group para cualificador de analito solamente.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Consulte MQ_Group para cualificador de patrón interno solamente.
AnalyteRatio	PictureField	Muestra las superposiciones de cromatogramas de cuantificador y cualificador del subgrupo de analitos. Muestra la línea continua del medio para indicar la proporción de iones esperada. La línea media = altura del pico del cuantificador x proporción de iones esperada. Muestra los límites superior e inferior del rango de proporción de iones aceptable con líneas de puntos. Límite inferior = altura de pico del cuantificador x proporción de iones esperada x $((100-\text{tolerancia})/100)$. Límite superior = altura de pico del cuantificador x proporción de iones esperada x $((100+\text{tolerancia})/100)$.
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Muestra las superposiciones de cromatogramas de cuantificador y cualificador del subgrupo de analitos sin las líneas.
Calibration	PictureField	Muestra la curva de calibración del analito.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
IS_AnalyteRatio	PictureField	Muestra las superposiciones de cromatogramas de cuantificador y cualificador del subgrupo del patrón interno. Muestra la línea continua del medio para indicar la proporción de iones esperada. La línea media = altura del pico del cuantificador x proporción de iones esperada. Muestra los límites superior e inferior del rango de proporción de iones aceptable con líneas de puntos. Límite inferior = altura de pico del cuantificador x proporción de iones esperada x $((100-\text{tolerancia})/100)$ Límite superior = altura de pico del cuantificador x proporción de iones esperada x $((100+\text{tolerancia})/100)$
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Muestra las superposiciones de cromatogramas de cuantificador y cualificador del subgrupo del patrón interno sin las líneas.
IS_PeakReview	PictureField	Muestra el cromatograma del patrón interno.
Overlay_All_XIC	PictureField	Muestra la superposición de los cromatogramas de todos los analitos de la muestra.
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	Muestra la superposición de los cromatogramas de todos los analitos y patrones internos de la muestra.
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	Muestra la superposición de los cromatogramas de todos los analitos y patrones internos de la muestra, sin la leyenda.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Muestra la superposición de los cromatogramas de todos los analitos de la muestra, sin la leyenda.
PeakReview	PictureField	Muestra el cromatograma del analito.
TIC	PictureField	Muestra el TIC de la muestra.
Acquisition_Date	TextField	Fecha en la que se adquirió la muestra. Muestra la «Fecha y hora de adquisición».
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Muestra el periodo de tiempo de los datos adquiridos de la muestra, en minutos.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Acquisition_Method	TextField	Método de adquisición utilizado para adquirir los datos de la muestra. Muestra el «Nombre del método de adquisición».
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Muestra el «Comentario del componente».
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Muestra el valor R de la regresión.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Muestra la ecuación de regresión, incluyendo el valor R y ponderación.
Analyte_Concentration	TextField	Concentración real del analito, tal como la definió el usuario en la tabla de resultados. Muestra la «Concentración real».
Analyte_Expected_RT	TextField	Tiempo de retención esperado para un determinado analito, en minutos. Muestra el «Tiempo de retención esperado».
Analyte_Integration_Type	TextField	Tipo de integración utilizado para unos picos determinados del analito. Los picos se pueden integrar manualmente o mediante los parámetros disponibles. Muestra el «Tipo de integración».
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Proporción del área del pico del analito respecto al área del pico de una solución del patrón interno. Se calcula con Área del pico del analito / Área de picos del patrón interno. Muestra la «Proporción de área».
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Proporción de la altura en recuentos por segundo (cps) del área del pico del analito respecto a la altura del pico de una solución del patrón interno. Se calcula con Altura del pico del analito / Altura del pico del patrón interno. Muestra la «Proporción de altura».
Analyte_Mass_Ranges	TextField	Transición de MRM definida por el usuario para un analito, definida en el método de adquisición utilizado. Muestra la «Información de masa».

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Analyte_Peak_Area	TextField	Área del pico de un analito en un cromatograma. Muestra el «Área».
Analyte_Peak_Height	TextField	Altura del pico del analito, expresada en recuentos por segundo (cps). Muestra la «Altura».
Analyte_Peak_Name	TextField	Nombre definido por el usuario asignado a unas determinadas muestras al crear la tabla de resultados. Muestra el «Nombre del componente».
Analyte_Peak_Width	TextField	La anchura del pico del analito, expresada en minutos. Muestra la «Anchura total».
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	La anchura al 50 % de la altura del pico de un analito, expresada en minutos. Muestra la «Anchura al 50 %».
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Muestra la información de integración, incluyendo algoritmo y parámetros.
Analyte_QTY	TextField	Cantidad de analito, calculada a partir de la concentración calculada de analito y la relación peso/volumen (por ejemplo, ng de analito por gramo de muestra). Muestra la «Calidad».
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	Es el primer analito del grupo.
Analyte_Processing_Algo	TextField	Muestra el algoritmo de integración.
Analyte_Retention_Time	TextField	Tiempo real de retención para un analito en un cromatograma utilizado para generar una tabla de resultados. Muestra el «Tiempo de retención».
Analyte_R_Squared	TextField	Muestra el valor R^2 de la regresión.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Analyte_RT_Window	TextField	Intervalo de tiempo, expresado en segundos, en el que se espera que aparezca un pico de analito. El centro de este intervalo es el tiempo de retención esperado para el analito. Muestra el valor «Media ventana de tiempo de retención» de los parámetros de integración.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	La relación señal/ruido para un pico determinado del analito. Muestra la «Relación señal/ruido».
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	Pendiente de la línea de referencia de un analito, expresada en porcentaje de intensidad/minutos. Muestra la «Pendiente de la línea de referencia» del analito.
Analyte_Start_Scan	TextField	Análisis de inicio del analito.
Analyte_Start_Time	TextField	El momento en el que comienza el pico del analito, expresado en minutos. Muestra el «Tiempo de inicio».
Analyte_Stop_Scan	TextField	Análisis de finalización del analito.
Analyte_Stop_Time	TextField	El momento en el que finaliza el pico del analito, expresado en minutos. Muestra el «Tiempo final».
Analyte_Unit	TextField	Unidades utilizadas para representar la concentración para los analitos. La unidad estándar para las tablas de resultados es ng/ml. Muestra las «Unidades de concentración».
Analyte_Use_Record	TextField	Casilla seleccionable que determina si se va a utilizar un registro determinado para los análisis posteriores, como de curvas de calibración. Muestra «Usado».
Analyte_Count	TextField	Muestra el número total de analitos.
Analyte_Index	TextField	Muestra el número de orden del analito en la muestra, empezando desde 0.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Calculated_Accuracy	TextField	Precisión del pico del analito, derivada de comparar la concentración real del analito con la concentración calculada del analito. Muestra la «Precisión».
Calculated_Concentration	TextField	La concentración calculada del pico del analito llevada a cabo por el software Analyst [®] MD mediante el uso del área de picos. Muestra la «Concentración calculada».
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Tiempo de retención para un analito o un registro determinado del patrón interno en una tabla de resultados. Muestra el «Tiempo de retención relativo».
IS_Concentration	TextField	Concentración real de un patrón interno, tal como la definió el usuario en la tabla de resultados. Muestra la «Concentración real del patrón interno».
IS_Expected_RT	TextField	El tiempo de retención esperado de un pico detectado, en minutos. Muestra el «Tiempo de retención esperado de patrón interno».
IS_Integration_Type	TextField	Tipo de integración utilizado para unos picos determinados del patrón interno. Los picos se pueden integrar manualmente o mediante los parámetros disponibles. Muestra el «Tipo de integración de patrón interno».
IS_Mass_Ranges	TextField	Transición de MRM definida por el usuario para un patrón interno, definida en el método de adquisición utilizado. Muestra la «Información de masa de patrón interno».
IS_Peak_Area	TextField	Área del pico para un patrón interno. Muestra el «Área de patrón interno».

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
IS_Peak_Height	TextField	Altura del pico del patrón interno, expresada en recuentos por segundo (cps). Muestra la «Altura de patrón interno».
IS_Peak_Name	TextField	Nombre definido por el usuario asignado a un determinado patrón interno cuando se crea la tabla de resultados. Muestra el «Nombre de patrón interno».
IS_Peak_Width	TextField	La anchura del pico del analito, expresada en minutos. Muestra la «Anchura total de patrón interno».
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	La anchura del pico, en minutos de un pico del patrón interno a mitad de su altura, expresada en recuentos por segundo (cps). Muestra la «Anchura del patrón interno al 50 %».
IS_Retention_Time	TextField	Tiempo de retención real para un patrón interno. Muestra el «Tiempo de retención de patrón interno».
IS_RT_Window	TextField	Intervalo de tiempo, expresado en segundos, en el que se espera que aparezca un pico de patrón interno. El centro de este intervalo es el tiempo de retención esperado para el patrón interno. Muestra el valor de «Media ventana de tiempo de retención» de los parámetros de integración para el patrón interno.
ISQuantPeak_Info	TextField	Muestra la información de integración, incluyendo algoritmo y parámetros.
IS_Signal_To_Noise	TextField	Relación señal/ruido de un pico del patrón interno. Muestra la «Relación señal/ruido de patrón interno».
IS_Slope_of_Baseline	TextField	Pendiente de la línea de referencia de un patrón interno, expresada en porcentaje de intensidad/ minutos. Muestra la «Pendiente de la línea de referencia» del patrón interno.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
IS_Start_Scan	TextField	Análisis de inicio del patrón interno.
IS_Start_Time	TextField	El momento en el que comienza el pico del patrón interno, expresado en minutos. Muestra el «Tiempo de inicio de patrón interno».
IS_Stop_Scan	TextField	Tiempo de parada del patrón interno.
IS_Stop_Time	TextField	El momento en el que finaliza el pico del patrón interno, expresado en minutos. Muestra el «Tiempo final de patrón interno».
IS_Units	TextField	Unidades utilizadas para representar la concentración para los patrones internos. La unidad estándar para las tablas de resultados es ng/ml. Muestra las «Unidades de concentración» para el patrón interno.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Muestra el valor de la máx. tolerancia de precisión para LLOQ en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Muestra el valor de la máx. tolerancia de precisión para patrones en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Muestra el valor de la máx. tolerancia de precisión para controles de calidad en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Muestra el nombre del grupo del analito.
MQ_Created_With	TextField	Muestra el nombre del producto que se usó para generar el informe.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Muestra la «Proporción de iones esperada».
MQ_Group_Index	TextField	Muestra el número de orden del grupo en la muestra, empezando desde 1. Usar con el bucle ForEach MQ_Group.
MQ_Group_Name	TextField	Muestra el nombre del grupo. Usar con el bucle ForEach MQ_Group.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Muestra la «Proporción de iones».

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Muestra el valor de la máx. tolerancia de proporción de iones para el analito en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Muestra el nombre del grupo del patrón interno.
MQ_IsRowHidden	TextField	Muestra la fila oculta de la tabla de resultados.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Muestra el valor del límite inferior de concentración calculada en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Muestra las «Razones de valores atípicos».
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Muestra el «Factor de asimetría».
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Muestra la «Línea de referencia delta/altura».
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Muestra el «Tiempo final al 10 %».
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Muestra el «Tiempo final al 5 %».
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Muestra los «Puntos a lo largo de la línea de referencia».
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Muestra los «Puntos a lo largo de media altura».
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Muestra el «Tiempo de inicio al 10 %».
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Muestra el «Tiempo de inicio al 5 %».
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Muestra el «Factor de bajada».
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Muestra la «Anchura al 10 %».
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Muestra la «Anchura al 5 %».
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Muestra el «Rango de masas» para el cuantificador en el grupo del analito.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Muestra el «Área» para el cuantificador en el grupo del analito.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Muestra la «Concentración calculada» para el cuantificador en el grupo del analito.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Muestra la fecha en que se generó el informe, reflejando la configuración de cultura del software.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Muestra el valor del límite superior de concentración calculada en el cuadro de diálogo Outlier Setting del método de cuantificación.
Query_Name	TextField	Nombre de la consulta mencionada en la plantilla de informe (si corresponde).
Record_Modified	TextField	Muestra «Modificado».
Reporter_Template_Name	TextField	Nombre de la plantilla de informe utilizada para crear el informe.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Muestra la fecha en que se creó la tabla de resultados.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Muestra el algoritmo de procesamiento utilizado para procesar la tabla de resultados (por ejemplo, MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Muestra el nombre de archivo de la tabla de resultados.
ResultTbl_ProjName	TextField	Muestra el nombre del proyecto en el que se guardó la tabla de resultados.
Sample_Comment	TextField	Comentario correspondiente a la muestra. Muestra el «Comentario de la muestra».
Sample_Dilution_Factor	TextField	Número total de unidades de volumen en las que está disuelta la muestra. Muestra el «Factor de dilución».
Sample_File_Name	TextField	Nombre del archivo de datos donde están almacenados los datos sin procesar de la muestra específica. Muestra el «Nombre original del archivo».
Sample_ID	TextField	Valor definido por el usuario para incorporar los ID específicos de cada muestra o analito en la tabla de resultados. Muestra el «ID de la muestra».
Sample_Index	TextField	Muestra el «Índice».
Sample_Count	TextField	Muestra el número total de analitos.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Sample_InjectionVolume	TextField	Volumen de inyección utilizado en el procesador de muestras automático que se utiliza cuando se ha inyectado la muestra original, del modo que está definido en el método de adquisición. Muestra el «Volumen de la inyección».
Sample_Instrument	TextField	Muestra el tipo de instrumento usado para adquirir la muestra, que se toma del archivo wiff.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Muestra el número de serie del instrumento usado para adquirir la muestra, que se toma del archivo wiff.
Sample_Name	TextField	Nombre definido por el usuario asignado a una determinada muestra cuando se crea la tabla de resultados. Muestra el «Nombre de la muestra».
Sample_Operator	TextField	Usuario que tiene la sesión iniciada en el momento de la adquisición. Muestra el «Nombre del operador».
Sample_Plate_Number	TextField	Posición de la placa de muestras utilizada en el procesador de muestras automático durante la adquisición de las muestras. Muestra el «Número de placa».
Sample_Rack_Number	TextField	Posición del bastidor de muestras utilizada en el procesador de muestras automático durante la adquisición de las muestras. Muestra el «Número de bastidor».
Sample_Type	TextField	Valor definido por el usuario que indica de qué tipo de muestra procede cada inyección. Por ejemplo, muestra en blanco, estándar, etc. Muestra el «Tipo de muestra».
Sample_Vial_Position	TextField	Posición del vial definida en el lote de adquisición utilizado en el procesador de muestras automático para determinar qué vial lleva la muestra. Muestra el «Número de vial».
Sample_File_Full_Name	TextField	Muestra el nombre del archivo con la ruta completa.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Muestra el número de orden de la muestra en el archivo wiff, empezando desde 0.
Sta_Accuracy	TextField	Precisión del pico del analito, determinada por comparación de la concentración real del analito con la concentración calculada del analito. Muestra la «Precisión».
Sta_CV	TextField	Muestra el porcentaje de varianza condicional que indica cómo de lejos o de cerca, en términos porcentuales, se desvía un valor de concentración calculado del valor de concentración promedio. Calculado tomando la desviación estándar/promedio.
Sta_ExpectedConcent	TextField	Concentración esperada de un analito calculada por el software Analyst® MD usando el área de picos. Muestra la «Concentración real».
Sta_Mean	TextField	Muestra el valor promedio (o de media) para las concentraciones estimadas que calcula el software Analyst® MD.
Sta_NumVal	TextField	Muestra el número de valores que conforman la estadística. Cuántas muestras se tienen en cuenta cuando se calcula un promedio.
Sta_QCAccuracy	TextField	La precisión determinada mediante la comparación de la concentración esperada con la concentración real de una muestra de control de calidad, tal como la ha definido el usuario en la columna de tipo de muestra. Muestra la «Precisión».
Sta_QCCV	TextField	Muestra el porcentaje de varianza condicional que indica cómo de lejos o de cerca, en términos porcentuales, se desvía un valor de concentración calculado del valor de concentración promedio. Calculado tomando la desviación estándar/promedio. Se aplica a una muestra de control de calidad.

Tabla C-2 Etiquetas de plantillas de informes (continuación)

Type	Tipo de campo	Descripción de la etiqueta
Sta_QCExpectedConcent	TextField	Concentración esperada para una muestra de control de calidad, tal como la ha definido el usuario. Muestra la «Concentración real» para la muestra de control de calidad.
Sta_QCMean	TextField	Muestra el valor promedio (o de media) para las concentraciones estimadas que calcula el software Analyst [®] MD para una muestra de control de calidad.
Sta_QCNumVal	TextField	Muestra el número de valores que se tienen en cuenta para un promedio de concentración de muestra de control de calidad cuando se calcula el promedio.
Sta_QCStdDev	TextField	Muestra la desviación estándar de los valores de concentración para cada muestra. La desviación estándar representa una medición del alcance de un conjunto de valores a partir del valor promedio.
Sta_StdDev	TextField	Muestra la desviación estándar para una muestra estándar. La desviación estándar representa una medición del alcance de un conjunto de valores a partir del valor promedio.
CUSTOM	TextField	Muestra el valor de las columnas personalizadas de la tabla de resultados.

Cálculos de ruido relativo y relación señal/ruido

D

Cuando se lleva a cabo un procesamiento de datos de espectrometría de masas cuantitativo, es importante determinar si un pico determinado es significativo o no, donde «significativo» significa típicamente «¿supera esta señal el ruido de fondo?».

Normalmente, la altura del pico se compara con el ruido de fondo medido en una región sin picos, donde el ruido se calcula típicamente como una o tres veces la desviación estándar de los puntos de datos en este rango. Este enfoque no es ni mucho menos ideal, por las razones siguientes:

- Es subjetivo, porque la región de ruido se selecciona manualmente.
- Podría no existir una región de fondo sin pico, o la región podría ser demasiado estrecha como para calcular con precisión el ruido.
- El ruido en la posición del pico podría diferir mucho del de la región de ruido seleccionada.
- El factor «uno o tres» también es subjetivo, y hay distintas recomendaciones dependiendo del experto.
- El ruido aparente se puede alterar si los datos se han preprocesado. Por ejemplo, si se han suavizado o se ha establecido un umbral.

Utilizando el concepto de ruido relativo (R_n), es fácil desarrollar un método simple para calcular el ruido esperado en cualquier punto de los datos, para comparar contra la señal medida. Esta es una métrica sólida y objetiva, que se puede usar para calcular la relación señal/ruido (S/N) y para evaluar y comparar el rendimiento del instrumento y del ensayo. Existen muchas aplicaciones del concepto de ruido relativo, una de las cuales es el cálculo de la S/N .

El algoritmo básico funciona de la forma siguiente:

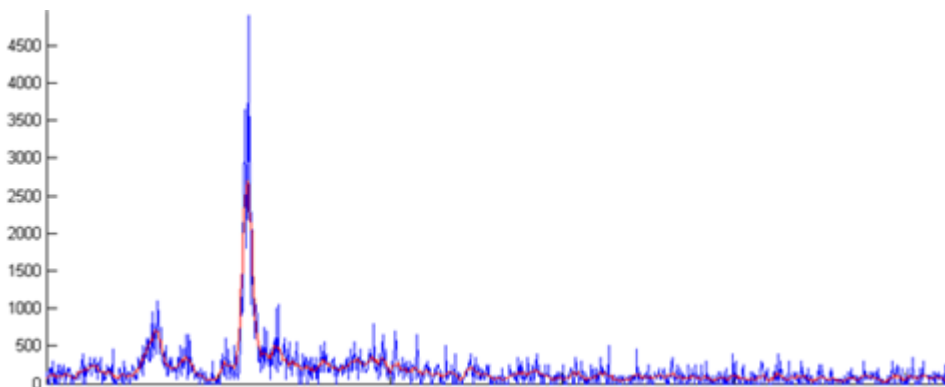
1. Se diseña un modelo de señal que permita al usuario calcular el ruido esperado en cualquier punto del registro de datos, dado el nivel de señal subyacente en ese punto.

El modelo de ruido se puede determinar a partir de consideraciones teóricas o se puede modelar a partir de mediciones reales para un sistema particular. Para detectores con pulsímetro, la desviación estándar de una señal, y por tanto del ruido esperado, es proporcional a la raíz cuadrada de la señal y por tanto varía con la señal. En otros sistemas habrá un componente de «ruido blanco» constante, posiblemente combinado con un componente dependiente de la intensidad.

2. Se calcula la señal subyacente a partir de la señal medida.

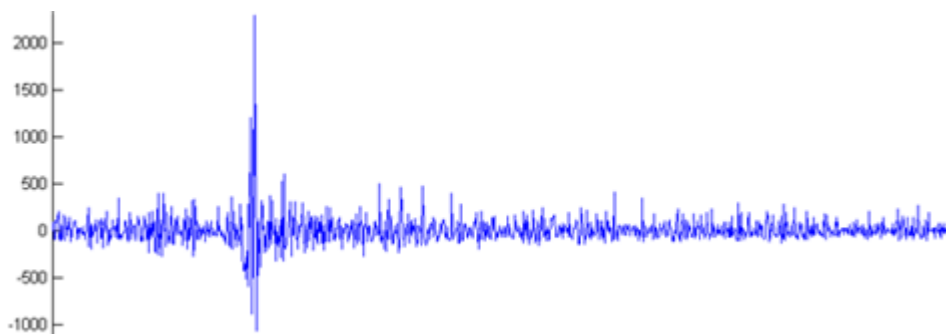
Esto se puede conseguir de muchas formas, pero la más sencilla es generar una versión suavizada de los datos, como se muestra en la [Figura D-1](#).

Figura D-1 Superposición de los datos sin procesar y suavizados



3. Se mide el ruido real a través de los datos usando todos los puntos (picos y fondo).
Esto se consigue restando el cálculo de señal subyacente de la señal medida en cada punto de los datos en el que la señal suavizada se haya restado del original. Esto se conoce como el ruido delta. El rango de ruido delta es razonablemente constante, excepto donde hay picos grandes, porque el ruido es dependiente de la señal y por tanto mayor donde la señal es más grande. Consulte la [Figura D-2](#).

Figura D-2 Representación de los valores de ruido delta de cada punto de datos



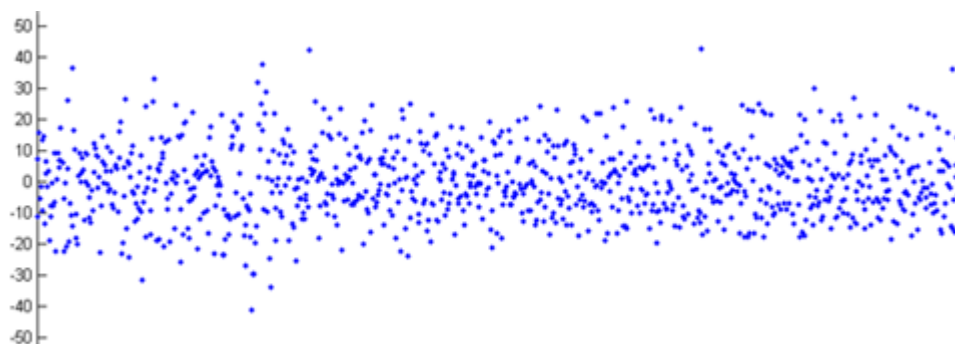
4. En cada punto de datos, se calcula la proporción entre el ruido medido y el ruido esperado.

Esto es, en cada punto de datos dividimos el ruido medido en el paso 3 entre el valor que predice nuestro modelo de ruido (en nuestro caso, la raíz cuadrada de la intensidad). Si el modelo de ruido es bueno, entonces genera una serie de valores que en su mayor parte quedan dentro de ciertos límites, como muestra la [Figura D-3](#). La [Figura D-3](#) muestra también la representación de

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

Nota: Esto reduce la gran variación del ruido delta y se traduce en un conjunto de valores bien definido.

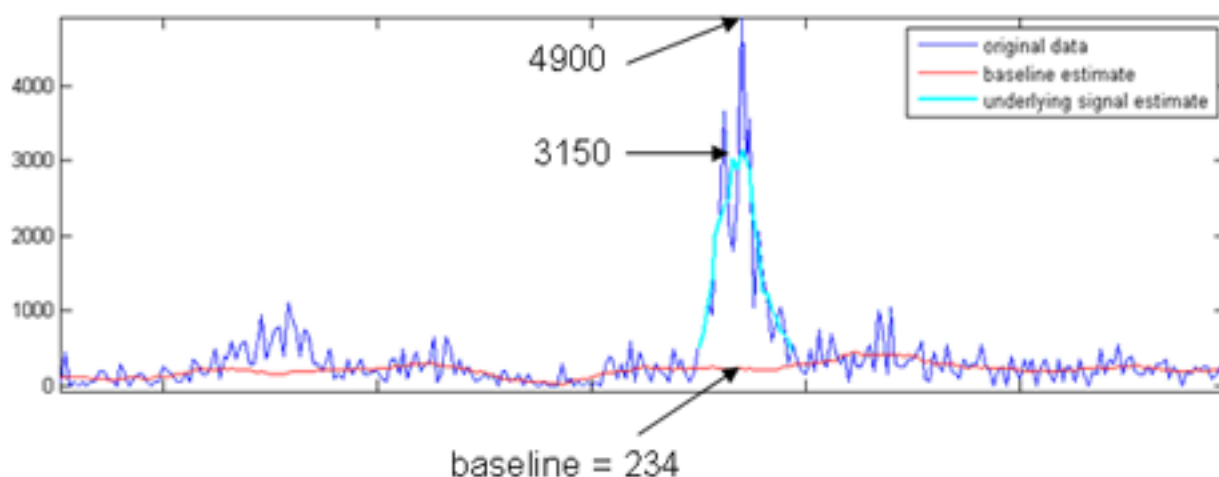
Figura D-3 Modelo de ruido



5. Se calcula la desviación estándar de los valores de la proporción. Este es el R_n , una estimación de la relación más probable entre el ruido delta real y el que predecía el modelo. En la [Figura D-3](#), esto se traduce en un valor de 9,5.

La [Figura D-4](#) muestra un ejemplo de cómo el ruido relativo se puede usar para calcular la S/N.

Figura D-4 Superposición de los datos sin procesar, estimación de señal subyacente y estimación de la línea de referencia



Como se describía anteriormente:

$$noise = R_n \times \sqrt{(baseline)}$$

en este ejemplo en particular:

$$noise = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Si el ápice del pico se usa como la señal, entonces esto nos da una S/N de 34 (4900/145) y si se utiliza la altura de la señal suavizada, esto nos da entonces una S/N de 22 (3150/145).

Cuando proporciona la S/N, el algoritmo de integración MQ4 utiliza el procedimiento descrito aquí y el ápice del pico como la señal. Como el algoritmo de integración SignalFinder™ está acoplando un modelo al pico, usa la altura del perfil empleado. Esto se traduce en que arroja una S/N más pequeña. Sin embargo, es un valor más preciso, porque se ve menos afectado por los posibles picos de ruido. El algoritmo de integración SignalFinder tiene también un enfoque más sofisticado para el cálculo de la línea de referencia, así que, por estas dos razones, los valores de S/N que arrojan estos dos algoritmos no son idénticos, aunque serán normalmente muy similares.

En resumen, si comparamos con el procedimiento habitual de calcular el ruido como la desviación estándar de una región de fondo, el procedimiento del ruido relativo para calcular la S/N tiene las ventajas siguientes:

- Es mucho menos subjetivo, ya que no es necesario seleccionar una región de fondo manualmente.
- Se puede predecir una S/N más exacta incluso si no existen regiones del cromatograma sin picos.

- La línea de referencia, y por tanto el ruido, se calculan cerca del pico de interés. Esto supone una gran diferencia con el valor de S/N arrojado, porque la región de fondo seleccionada para el procedimiento habitual podría ser mucho más silenciosa que el fondo cercano al pico. Como se describía anteriormente, la S/N calculada usando el procedimiento de **Relative Noise** podría dar valores más pequeños que con el procedimiento habitual. Sin embargo, son valores más precisos y útiles. Consulte la [Figura D-4](#).

Para hacer la columna **Signal/Noise** visible en la **Results Table**, consulte [Modificar las columnas mostradas en la tabla de resultados en la página 92](#).

Nota sobre la relación señal/ruido cuando se usa el algoritmo de integración SignalFinder

Como el algoritmo de integración SignalFinder™ calcula la relación señal/ruido con más precisión (y por tanto predice las CV con más exactitud), si se usa el procedimiento de señal/ruido 1-sigma, entonces hay que considerar disminuir el valor señal/ruido mínimo aceptable en cualquier procedimiento de funcionamiento estándar (SOP), basándose en datos empíricos del laboratorio.

Iconos del software

E

Solo hay activo un panel cada vez. Los paneles activos tienen un borde naranja y el usuario puede activar un panel haciendo clic en cualquier parte dentro del mismo. Muchos comandos de menú funcionan sobre el panel activo.

Los iconos de la barra de herramientas descritos en esta sección aparecen en la barra de herramientas específica del panel para todos los tipos de paneles. También hay disponibles iconos adicionales específicos para cada tipo de panel.

Tabla E-1 Iconos de la barra de herramientas









Icono	Nombre	Descripción
	New Results Table	Abre el New Results Table wizard .
	Open	Abre una Results Table .
	Save	Guarda todos los archivos abiertos.
	Select Analyst Project	Selecciona una carpeta de proyecto.
	Screen Lock	Bloquea la pantalla. Esta función solo está disponible cuando el software Analyst [®] MD está en modo mixto y está habilitada la funcionalidad de bloqueo de pantalla.
	Show Internal Standard with Analyte	Muestra las filas de la Results Table tanto para el analito seleccionado actualmente como para el patrón interno correspondiente. Cuando esta opción está seleccionada, el usuario puede hacer clic en el nombre de un analito para verlo con su patrón interno. Equivale a hacer clic en el analito y luego hacer clic en el patrón interno mientras se pulsa Ctrl (con lo que se seleccionan ambos).
	Find Component or Group	Selecciona los elementos de la lista que coincidan con el texto especificado.
	Arranging Panes	Cambia las posiciones relativas de los paneles. Haga clic en el icono de un panel y, a continuación, arrástrelo hacia la parte superior, inferior, izquierda o derecha de un segundo panel. Según donde se suelte el cursor, la posición del primer panel cambia respecto al segundo. Mientras se arrastra el cursor, un lado del segundo panel está resaltado en rojo para indicar dónde se insertará el primer panel.

Tabla E-1 Iconos de la barra de herramientas (continuación)





Icono	Nombre	Descripción
	Delete Pane	Elimina el panel. Si se elimina una Results Table , también se eliminan otros paneles relacionados (Peak Review y Calibration) y se cierra toda la ventana.
	Toggles tab mode	Maximiza el panel para que llene la ventana completa (o al contrario). Es útil cuando hay varios paneles en la ventana, por lo que el usuario puede centrarse temporalmente en uno. En modo ampliado, aparece una pestaña independiente en la parte superior de la ventana para cada panel. Cambie de panel haciendo clic en la pestaña adecuada. Desde el modo ampliado, vuelva a la vista original que muestra todos los paneles haciendo clic en Zoom Pane una segunda vez. Haciendo clic en el icono se alterna entre los dos estados.
	Hide Pane	Oculto el panel para que otros paneles de la ventana ocupen el espacio disponible.
	Show Hidden Panes	Muestra todos los paneles que se han ocultado con anterioridad.

Tabla E-2 Iconos de la barra de herramientas de revisión de picos






Icono	Nombre	Descripción
	Display Previous Page	Muestra el conjunto de cromatogramas anterior. Equivale a pulsar la tecla de flecha hacia arriba o hacia la izquierda, o a hacer clic en la flecha superior de la barra de desplazamiento.
	Display Next Page	Muestra el siguiente conjunto de cromatogramas. Equivale a pulsar la tecla de flecha hacia abajo o hacia la derecha, o a hacer clic en la flecha inferior de la barra de desplazamiento.
	Display Previous Sample	Se desplaza hacia atrás en el panel Peak Review . Equivale a hacer clic en la flecha hacia arriba en la barra de desplazamiento hasta que aparezca la primera muestra que sea distinta del primer cromatograma visible.
	Display Next Sample	Se desplaza a la siguiente muestra.
	Starts Slide Show Peak Review mode	Inicia la presentación de diapositivas. Al utilizarlo por primera vez, se abre el cuadro de diálogo Slide Show Options . Configure el tiempo de retardo entre picos en segundos. Para evitar que el cuadro de diálogo vuelva a abrirse, active la casilla de verificación Only show this dialog again if the shift key is down . Haga clic en cualquier parte del panel Peak Review para detener la presentación de diapositivas.

Tabla E-2 Iconos de la barra de herramientas de revisión de picos (continuación)






Icono	Nombre	Descripción
	Peak Magnifier	Amplía el pico seleccionado.
	Peak Demagnifier	Devuelve el pico ampliado a su tamaño original.
	Set Peak to 'Not Found'	<p>Haga clic para indicar que no hay ningún pico presente en el cromatograma activo. En algunos casos en los que no hay presente ningún pico significativo, se podrían integrar y registrar pequeños picos de ruido. Haga clic en este icono para eliminar este comportamiento. El área de pico aparece en la Results Table como N/A.</p> <p>Una vez que el usuario marca el pico como Not Found, los parámetros de detección de picos a la izquierda del panel no están disponibles para el cromatograma porque no se utilizan. Vuelva a hacer clic en el icono para regresar al modo automático.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Haga clic para pasar al modo de integración manual. Cuando el software esté en modo de integración manual, arrastre un gráfico de cromatograma para especificar la región exacta que se va a integrar. La integración comienza en el punto (tiempo, intensidad) en el que se hace clic en el cursor por primera vez y continúa hasta el punto en el que se suelta. Vuelva a hacer clic en el icono para salir del modo de integración manual.</p> <p>Una vez que el usuario integra el pico manualmente, los parámetros de detección de picos a la izquierda del panel no están disponibles para el cromatograma porque no se utilizan. Vuelva a hacer clic en el icono para regresar al modo automático.</p>
	Recalculate Peak Model	Recalcula el modelo de pico utilizando el cromatograma activo y lo aplica a este cromatograma (solo algoritmo de integración SignalFinder™).

Tabla E-3 Iconos de la barra de herramientas de calibración

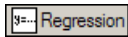
Icono	Nombre	Descripción
	Edit Regression and Weighting	Se utiliza para cambiar los parámetros de calibración. Esto incluye tanto el parámetro real utilizado para la regresión (Area o Height) como el tipo de regresión y la ponderación. Consulte la Ecuaciones de regresión en la página 128 .

Tabla E-4 Iconos de la barra de herramientas de estadísticas



Icono	Nombre	Descripción
	Remove Trailing Index from Sample Name	La Statistics Table se puede organizar de modo que las muestras (para un analito determinado) se agrupen por concentración real o por nombre de muestra. Al agrupar por nombre de muestra, la opción Remove Trailing Index from Sample Name controla si los nombres de muestra deben coincidir exactamente para poder agruparlos o si se debe eliminar un índice numérico de rastreo seguido de un guion (-). Por ejemplo, dos muestras con nombres de Muestra 1 - 001 y Muestra 1 - 002 se agruparían juntas si esta opción estuviese seleccionada, pero no si no lo estuviese.
	Sample Grouping	<p>Los elementos de esta lista especifican cómo se debe agrupar la muestra de un analito determinado para el cálculo de estadísticas. Están disponibles las siguientes opciones:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards: las muestras Standard se agrupan por concentración real. • Group by Concentration for QCs: las muestras Quality Control se agrupan por concentración real. • Group by Sample Name for Standards: las muestras Standard replicadas se agrupan por el campo Sample Name. Como se ha descrito anteriormente, si no se utiliza la opción Remove Trailing Index from Sample Name, los nombres de muestra deben coincidir exactamente. De lo contrario, los nombres pueden diferir en un número de rastreo (después de un guion). • Group by Sample Name for QCs: parecida a la opción anterior, excepto que solo se utilizan muestras Quality Control. • Group by Sample Name for All Samples: parecida a la opción anterior, excepto que se utilizan todas las muestras.

Tabla E-4 Iconos de la barra de herramientas de estadísticas (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Metric	<p>Los elementos de esta lista especifican la métrica real utilizada para el cálculo de estadísticas. Están disponibles las siguientes opciones:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration: se utiliza el campo Calculated Concentration de la Results Table. • Area: se utiliza el campo Area de la Results Table. • Height: se utiliza el campo Height de la Results Table. • Calibration Y-Value: se utiliza el parámetro de regresión especificado para el analito. Este es el Area o Height de un analito que no tiene un patrón interno correspondiente o la Area Ratio o la Height Ratio de un analito que no utiliza un patrón interno.

Tabla E-5 Iconos de la barra de herramientas de tabla de resultados

Icono	Información sobre herramientas	Descripción
	Displays the peak review	Muestra el panel Peak Review para poder comprobar la calidad de las integraciones de picos y modificarlas si es necesario.
	Displays the side by side sample review	Muestra dos listas de muestras para que los usuarios puedan seleccionar hasta seis muestras y comparar las respuestas de los picos entre las muestras.
	Displays the calibration curve	Muestra la curva de calibración (esto solo se aplica si se utilizan muestras Standard de concentración conocida). Este panel permite al usuario revisar la calibración y ajustar el tipo de regresión y la ponderación.
	Creates a metric plot	Muestra un gráfico de métricas para la columna o columnas seleccionadas. Estos gráficos pueden ser muy útiles para encontrar valores atípicos. El menú situado inmediatamente a la derecha del botón muestra cualquier configuración de gráfico guardada.
	Displays the statistics pane	Muestra el panel Statistics . Esta tabla muestra el promedio de concentración calculada, desviación estándar y CV para cada nivel de concentración.

Tabla E-5 Iconos de la barra de herramientas de tabla de resultados (continuación)




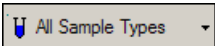






Icono	Información sobre herramientas	Descripción
	Sort selected column from smallest to largest	Ordena la Results Table de modo que los valores de la columna seleccionada se muestren en orden ascendente. Este icono solo está disponible solo después de haber hecho clic en el encabezado de columna.
	Sort selected column from largest to smallest	Ordena la Results Table de modo que los valores de la columna seleccionada se muestren en orden descendente. Este icono solo está disponible solo después de haber hecho clic en el encabezado de columna.
	Removes any previous sorting	Si la tabla se ha ordenado, devuelve la Results Table al orden predeterminado.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtra la Results Table de modo que solo se vean las muestras de un tipo específico. Esto solo es útil si hay muestras Standard de concentración conocida y no todas las muestras son Unknowns .
	Hide selected row(s)	Ocultas las filas seleccionadas en la Results Table . Seleccione las filas que desee ocultar y luego haga clic en el icono. Como el panel Peak Review se sincroniza con la Results Table , ocultar las filas de aquellos picos que no necesiten revisarse agiliza el proceso de revisión. Por ejemplo, el usuario puede ordenar la tabla según la columna Quality y ocultar todas las filas con una calidad mayor de cierto valor (por ejemplo 0,8). Entonces la tabla se puede ordenar según la columna Region Height y se pueden ocultar todas las filas con un valor bajo (para ocultar las filas en las que el pico no exista claramente). El resultado es que solo serán visibles aquellos picos con una calidad baja, pero en los que el pico exista realmente. El usuario puede entonces repasar todas estas filas visibles desde el panel Peak Review en menos tiempo del que se tardaría en revisar todos los posibles picos.
	Show previously hidden row(s)	Muestra todas las filas. Las filas que se muestran podrían estar aún limitadas por el Sample Type Filter y la selección de la Components & Groups List .

Tabla E-5 Iconos de la barra de herramientas de tabla de resultados (continuación)

Icono	Información sobre herramientas	Descripción
	Show only outliers	Muestra solo las filas que contienen valores atípicos.
	Go to next outlier	Avanza hasta el siguiente valor atípico en la Results Table .
	Lock and Save	Bloquea la Results Table después de guardarla. Los cambios sobre la Results Table no se guardan a no ser que el archivo se desbloquee.
	Review and Save	Haga clic para guardar la Results Table después de revisarla. El icono no está disponible si la Results Table es de solo lectura.

Acceso al software MultiQuant™ MD

F

Nota: Cuando el software MultiQuant™ MD se elimina, los elementos de seguridad del software MultiQuant™ MD en el software Analyst® MD se conservan. Los permisos de seguridad se encuentran en la pestaña **Roles** del cuadro de diálogo **Security Configuration**.

Acceso predefinido	Descripción
Create session file	Permite a los usuarios crear una Results Table .
Create quantitation method	Permite a los usuarios crear métodos de cuantificación.
Modify quantitation method files	Permite a los usuarios modificar los métodos de cuantificación situados en la carpeta Quantitation Methods en la carpeta Analyst Data .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Permite a los usuarios exportar o crear informes de Results Tables sin bloquear.
Replace existing Results Table when saved	Permite a los usuarios actualizar Results Tables existentes, pero no les permite crear una Results Table nueva utilizando un nombre de Results Table existente. Por ejemplo, si se crea una Results Table llamada RT1, entonces los usuarios pueden actualizarla, pero no pueden crear una nueva Results Table usando el nombre RT1. Los usuarios no pueden nombrar una Results Table sin nombre utilizando un nombre de Results Table que ya exista.
Change default quantitation method integration algorithm	El cuadro de diálogo Integration Default permite a los usuarios cambiar el algoritmo. Haga clic en Edit > Project Integration Defaults .
Change default quantitation method integration parameters	El cuadro de diálogo Integration Default permite a los usuarios cambiar los parámetros predeterminados del algoritmo. Edit > Project Integration Defaults .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Permite a los usuarios activar o desactivar el indicador que habilita la opción Project Modified Peak Warning del menú Edit .
Allow Project Secure Export Settings	Si está habilitada, los datos del archivo de texto se cifran durante la exportación. Defina una contraseña para activar el cifrado.
Add samples to Results Table	Permite a los usuarios agregar muestras. Haga clic en Process > Add Samples .
Remove samples from Results Table	Permite a los usuarios eliminar las muestras seleccionadas. Haga clic en Process > Remove Selected Samples .

Acceso predefinido	Descripción
Export, import, or remove External Calibration	Permite a los usuarios exportar, importar o eliminar una calibración externa utilizando una de las siguientes opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Hacer clic en Process > Export Calibration. • Hacer clic en Process > Import External Calibration. • Hacer clic en Process > Remove External Calibration.
Change Audit Map settings	Permite a los usuarios modificar el mapa de auditoría del proyecto y modificar la definición del mapa de auditoría. Haga clic en Audit Trail > Audit Map Manager .
Modify Sample Name	Permite a los usuarios modificar el nombre de la muestra en la Results Table .
Modify Sample Type	Permite a los usuarios cambiar el tipo de muestra (Standard, QC, Unknown) en la Results Table .
Modify Sample ID	Permite a los usuarios modificar el ID de la muestra en la Results Table .
Modify Actual Concentration	Permite a los usuarios modificar la concentración real del Standard y QC en la Results Table .
Modify Dilution Factor	Permite a los usuarios modificar el factor de dilución en la tabla de resultados.
Modify Comment Fields	Permite a los usuarios modificar los campos de comentarios: <ul style="list-style-type: none"> • Component Comment • IS Comment • IS Peak Comment • Peak Comment • Sample Comments
Allow manual integration	Permite a los usuarios habilitar el modo de integración manual en el panel Peak Review . Si este permiso está habilitado, se debe habilitar entonces también el permiso Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram . El comando Allow manual integration se puede deshabilitar si está habilitado Modify Results Table integration parameters .
Allow set to Peak Not Found	Permite a los usuarios utilizar Set peak to not found . Para realizar esta acción, haga clic con el botón derecho en el panel Peak Review .
Include or exclude a peak from the Results Table	Permite a los usuarios incluir o excluir picos de las Results Tables , Statistic Tables y curvas de calibración.
Modify regression settings for fit and weight	Permite al usuario modificar la configuración de regresión en el panel de curva de calibración cuando usa la funcionalidad Modify Results Table Method y cuando usan el asistente New Quantitation Method .

Acceso predefinido	Descripción
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Permite al usuario modificar un único cromatograma.
Modify quantitation method for the Results Table component	Permite al usuario aplicar las modificaciones de los cromatogramas únicos al componente. Los usuarios tienen que tener habilitado este permiso y el de Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram si quieren actualizar y después aplicar las modificaciones individuales a los componentes.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Permite a los usuarios crear y usar gráficos de métricas en la Results Table (el botón Metric Plot está habilitado) o exportar gráficos de métricas. Haga clic en File > Export .
Set Peak Review Title Format	Permite a los usuarios modificar el Peak Review Title Format in Peak Review . Para realizar esta acción, haga clic con el botón derecho en el panel Peak Review .
Add, Rename, or Modify custom column	Permite a los usuarios añadir, renombrar o modificar una columna personalizada. Incluso sin este permiso, los usuarios pueden ejecutar consultas que crearán automáticamente columnas personalizadas. Si este permiso está deshabilitado, se debe deshabilitar también el permiso Remove custom column . Remove custom column se puede deshabilitar si el permiso Add, Rename or Modify custom column está habilitado.
Remove custom column	Permite a los usuarios eliminar una columna personalizada de la Results Table .
Modify Results Table column settings	Permite a los usuarios modificar la configuración de la columna de Results Table dentro de una Results Table .
Save Column Settings as Project Default	Permite a los usuarios aplicar la configuración de la columna al proyecto.
Lock and save Results Table	Permite a los usuarios bloquear y guardar una Results Table .
Unlock and save Results Table	Permite a los usuarios desbloquear y guardar una Results Table .
Review and save Results Table	Permite a los usuarios revisar y guardar la Results Table .
Edit Report Template	Permite a los usuarios editar las plantillas de informe.
Transfer to LIMS	Permite a los usuarios transferir una Results Table guardada y bloqueada a un LIMS. El suceso se guarda en las pistas de auditoría.

Configuración de seguridad

La [Tabla F-1](#) contiene la configuración de seguridad recomendada para las funciones del usuario.

Tabla F-1 Configuración de seguridad basada en las funciones del usuario

Configuración de seguridad	Administrador	Supervisor	Analista	Revisor
Crear archivo de sesión	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Crear métodos de cuantificación	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Modificar los archivos de método de cuantificación	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Permitir exportar y crear informes de tabla de resultados sin bloquear	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Reemplazar una tabla de resultados existente al guardarla	Acceso	Acceso	Sin acceso	Acceso
Cambiar el algoritmo de integración del método de cuantificación predeterminado	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Cambiar los parámetros de integración del método de cuantificación predeterminados	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Permitir la activación de advertencia de pico modificado en proyecto	Acceso	Sin acceso	Sin acceso	Sin acceso
Permitir la configuración de exportación segura de proyecto	Acceso	Sin acceso	Sin acceso	Sin acceso
Agregar muestras a la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso

Tabla F-1 Configuración de seguridad basada en las funciones del usuario (continuación)

Configuración de seguridad	Administrador	Supervisor	Analista	Revisor
Eliminar muestras de la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar el nombre de la muestra	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Modificar el tipo de muestra	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar el ID de la muestra	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Modificar la concentración real	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar el factor de dilución	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar los campos de comentarios	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Permitir la integración manual	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Permitir la configuración de pico no encontrado	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Incluir o excluir un pico de la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar la configuración de regresión para ajuste y ponderación	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Modificar los parámetros de integración de la tabla de resultados para un único cromatograma	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso
Modificar el método de cuantificación para el componente de la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Sin acceso

Tabla F-1 Configuración de seguridad basada en las funciones del usuario (continuación)

Configuración de seguridad	Administrador	Supervisor	Analista	Revisor
Crear, utilizar o exportar gráficos de métricas en las tablas de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Acceso
Configurar formato de título de revisión de picos	Acceso	Sin acceso	Sin acceso	Sin acceso
Agregar, renombrar o modificar las columnas personalizadas	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Eliminar una columna personalizada	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Modificar la configuración de la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Guardar la configuración de la columna como la predeterminada para el proyecto	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Bloquear y guardar la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Acceso	Acceso
Desbloquear y guardar la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Revisar y guardar la tabla de resultados	Acceso	Acceso	Sin acceso	Acceso
Modificar plantilla de informe	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Transferir a LIMS (controla también Iniciar transferencia a Watson LIMS).	Acceso	Acceso	Sin acceso	Acceso

Tabla F-1 Configuración de seguridad basada en las funciones del usuario (continuación)

Configuración de seguridad	Administrador	Supervisor	Analista	Revisor
Exportar, importar o eliminar la calibración externa	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso
Cambiar la configuración del mapa de auditoría	Acceso	Acceso	Sin acceso	Sin acceso

Historial de revisiones

Revisión	Motivo del cambio	Fecha
A	Primera publicación del documento.	Septiembre de 2013
B	Sección Menú File actualizada. Sección Menú Audit Trail actualizada. Tabla de columnas de la tabla de resultados actualizada. Sección Informes actualizada.	Enero de 2015
C	Se ha cambiado el logotipo en la página de cubierta de AB SCIEX a SCIEX Diagnostics. Se ha actualizado la página de copyright y se ha cambiado de AB Sciex a SCIEX en los sitios oportunos. Se ha agregado Windows 10 al capítulo de Introducción al software. Se ha actualizado la sección Contacto. Se ha cambiado el título del tema Administrador de mapas de auditoría a Acerca de los mapas de auditoría. Se ha actualizado la descripción de la opción del menú Set Last Component of Group as IS en la sección Submenú de patrones internos. Se ha reemplazado «parámetro de porcentaje de área total» por «tiempo de retención» en la sección Cuadro de diálogo Update Retention Time. Se ha actualizado la descripción del tiempo de retención esperado en la sección Parámetros del algoritmo de integración SignalFinder. Se ha añadido Windows 10 a la sección Crear informes. Se ha actualizado el contenido de la sección Etiquetas de plantillas de informes. Se ha cambiado la captura de pantalla en la Figura 7-3. Se aplicaron nuevas plantillas al contenido, lo que ha generado algunos cambios de edición en el contenido. Se han eliminado todas las referencias a Windows XP.	Junio de 2017